

Université Hassan II Mohammedia -Casablanca
Faculté des Sciences et Techniques
Département de Physique

MODULE P146 POUR MIP
MECANIQUE QUANTIQUE ET RELATIVITE RESTREINTE

A L'USAGE DES ETUDIANTS DE LA DEUXIEME ANNEE MIP

J. MEZIANE

ANNEES UNIVERSITAIRES 2014/2015

Chapitre I : Introduction aux phénomènes quantiques

1) Introduction

Physique quantique : c'est la physique des phénomènes microscopiques à l'échelle atomique ou subatomique, elle étudie les interactions matière-rayonnement.

C'est la mécanique des particules atomiques et intra-atomiques tel que : l'atome (Hydrogène ; alpha = Hélium sans électron He^{++} ; …) ; l'électron ; le proton ; le neutron ; le neutrino ; …

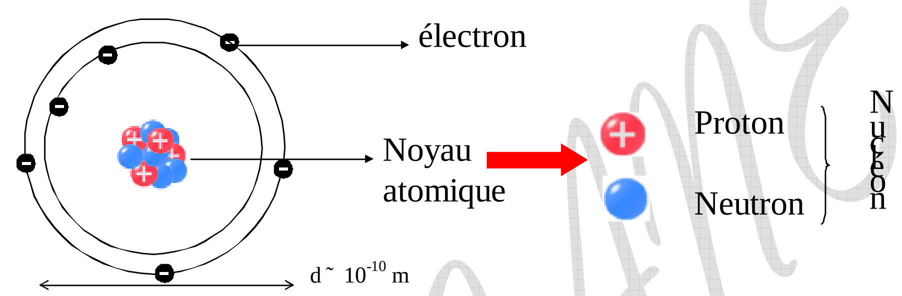


Fig.1 : Les particules atomiques ou subatomiques

La mécanique quantique s'intéresse principalement aux interactions entre la matière et le rayonnement.

- **Le rayonnement** englobe la lumière visible, les rayons Ultra Violet, Rayons Infra rouge ; Rayons X, Rayons Gamma, Rayons cosmique, …, les ondes hertziennes, les micros ondes …

  Le rayonnement = onde Electromagnétique (E, B) = (Champ électrique, Champ magnétique).

- **La matière** principalement les atomes (Hydrogène ; alpha = Hélium sans électron He++ ; …) ; les électrons ; les protons ; les neutrons ; les neutrinos ; …

En Mécanique Quantique :

La matière et le rayonnement subissent le même traitement

- Les particules se comportent comme un rayonnement.
- Et le rayonnement se comporte comme des particules.

1.a) Les ondes électromagnétiques sont des particules « photons » :

Elles seront caractérisé par :

i) Quantité de mouvement

$$\vec{P} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k$$

$$P = \|\vec{P}\| = \frac{h}{\lambda}$$

ii) Énergie

$$E = \hbar\omega = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = P\,c$$

$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k$ vecteur d'onde

$\vec{e}_k$ *étant le vecteur unitaire de la direction de propagation.*

$k = \|\vec{k}\| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le nombre d'onde ou le vecteur d'onde.

λ : longueur d'onde
υ : fréquence c/λ
ω : pulsation 2π υ

1.b) Les particules sont des ondes.

Elles seront caractérisé par :

i) Quantité de mouvement

$$\vec{P} = m\vec{v} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k = \frac{h}{\lambda}\vec{e}_k$$

$$P = \|\vec{P}\| = mv = \frac{h}{\lambda}$$

ii) Énergie

$$E_{tot} = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + E_p = \hbar\omega$$

Elles ont une longueur d'onde λ :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

λ : longueur d'onde associée à la particule
m : masse de particule
v : vitesse de la particule
h = 6.6261 10^{-34} J. s ; c = 3 10^{8} m/s

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

2) Aspects corpusculaires des ondes électromagnétiques : Les ondes sont des particules

La preuve par l'expérience que le rayonnement est composé de particules

Le rayonnement = Ondes = particule de masse m = 0 !!!! ? Photon

2. 1) Le problème du corps noir

Tout corps chauffé à une température T émet des ondes électromagnétiques

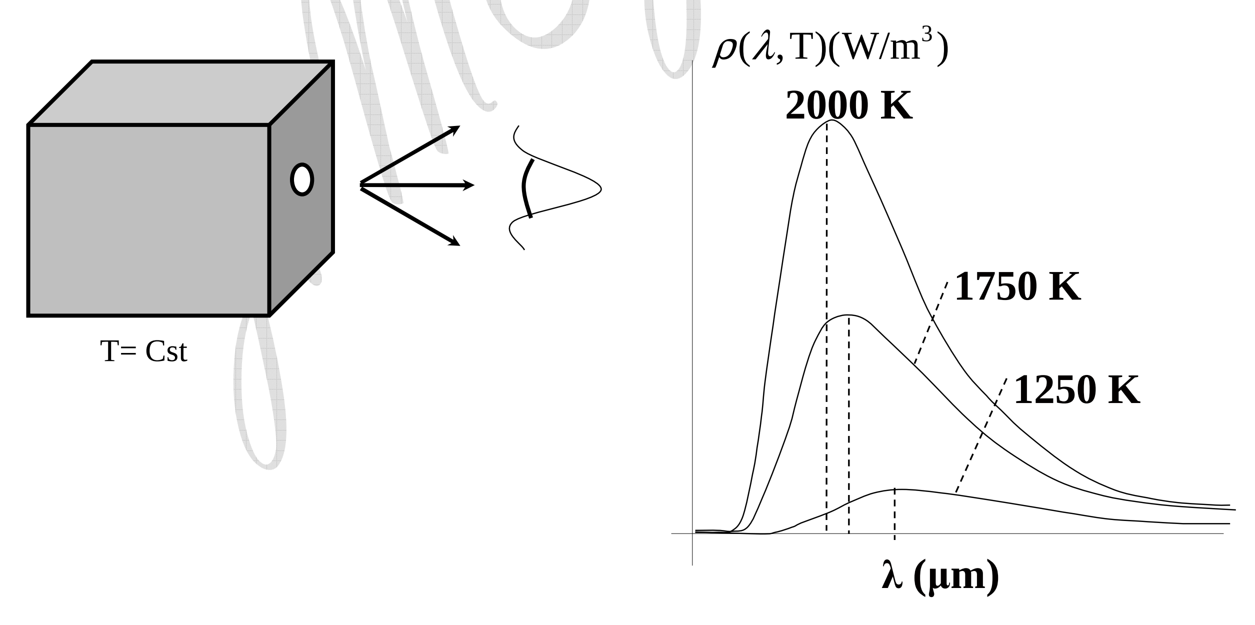


Fig. 7 : Corps noir

2.1.a) Loi Planck, 1900 (Lois du corps noir)

Planck fait l'hypothèse que les seules énergies possibles pour un mode de fréquence **ν** s'écrivent **$E_n = n\,h\nu$** où il a introduit :

Lois de Planck :

« L'énergie stockée dans un mode de fréquence ν et un multiple entier de l'énergie hν »

Conduit à

$$\rho(\upsilon,T) = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}}-1}$$

Sachant que

$$\rho(\nu,T)d\nu = \rho(\lambda,T)d\lambda = \rho(\omega,T)d\omega$$

On a

$$\rho(\lambda,T) = \frac{8\pi h c}{\lambda^5}\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}}-1}$$

h = 6.6261 10^{-34} J. s

ν fréquence

λ longueur d'onde

ω : pulsation

L'énergie totale émise par un corps noir est :

$$I = \rho(T) = \int_0^{+\infty}\rho(\upsilon,T)d\upsilon = \sigma T^4$$ la loi de Stefan Boltzmann (1879)

σ = 7,56 10^{-16} J. K^{-3} . m^{-3}

d'où

$$\lambda_{max}(m) = \frac{2{,}898710^{-3}}{T(K)}$$

2.2) Effet photo-électrique

Montage expérimental de l'effet photoélectrique

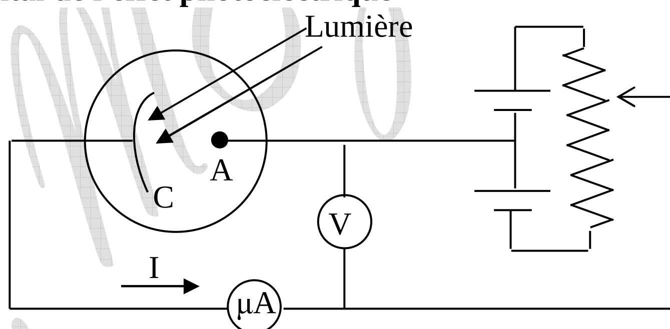


Fig 16 : Montage expérimental de l'effet photoélectrique

Le métal joue le rôle d'une cathode

Le collecteur joue le rôle de l'anode

La cathode portée à un potentiel V_C reçoit un rayonnement excitateur de fréquence ν et de puissance P.

L'anode portée à un potentiel V_A recueille les électrons émis par la cathode.

L'expérience consiste à mesurer l'intensité du courant I qui traverse la cellule photoélectrique en fonction des trois paramètres expérimentaux:

i) La puissance P *du rayonnement incident, c'est à dire la quantité d'énergie* apportée par la lumière à la cathode par unité de temps.

ii) La fréquence ν du rayonnement incident, à laquelle correspond la longueur d'onde λ=c/ν.

iii) La différence de potentiel V = VA -VC entre l'anode et la cathode.

2.2.1) Postulat d'Einstein (1905) :

La lumière incidente est constituée de paquets d'énergie (de photons d'énergie) :

$$E = h.\upsilon = h.c/\lambda$$

Pour extraire les électrons d'un métal il faut fournir une énergie :

$$h.\upsilon > W_s = h\,\nu_s$$

W_s est l'énergie d'extraction = énergie nécessaire pour arracher un seul électron.

L'excès d'énergie porté par le photon est transformé en énergie cinétique de l'électron.

$$E = h\upsilon = W_s + \frac{1}{2}mv_e^2 = h\upsilon_s + eU$$

- **Cas limite** = cas où l'électron arrive au collecteur avec une vitesse nulle $v_e = 0$.

$$E = h\upsilon = W_s + \frac{1}{2}mv_e^2 = h\upsilon_s$$

- **Potentiel d'arrêt : Cas d'inversion de polartié**

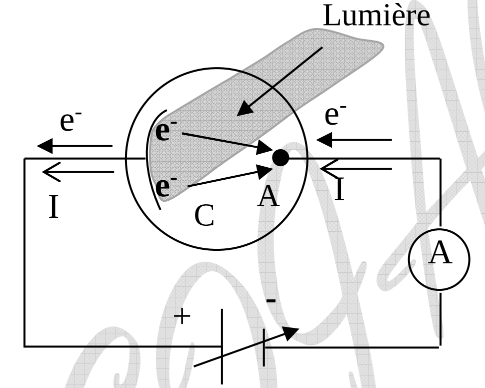


Fig. 22 inversion de la polarisation.

Si on inverse la polarité on repousse les électrons; ils seront arrêtés si :

$$\frac{1}{2}mv^2 + eV_0 = 0$$

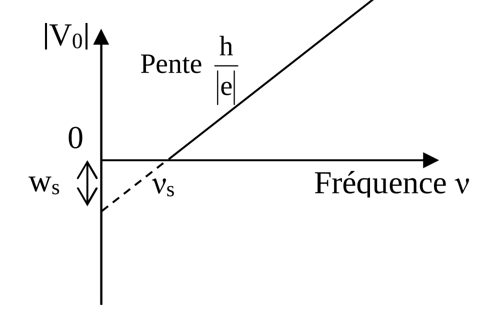
e = Charge de l'électron = 1,6 10^{-19} C

Où V_0 est le potentiel d'arrêt

$$V_0 = -\frac{h}{e}(\upsilon - \upsilon_s)$$

En pratique

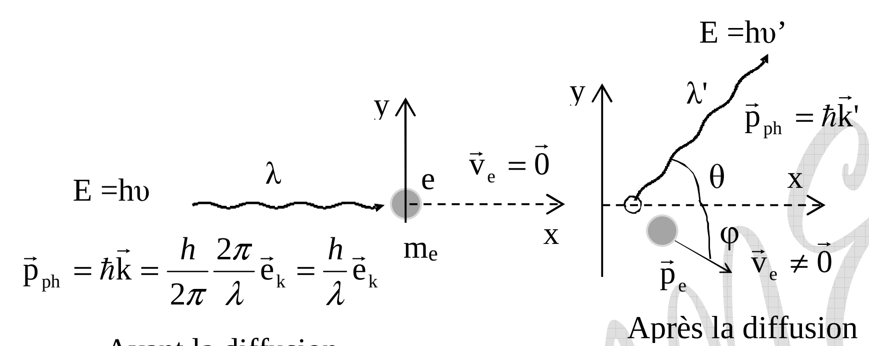
$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{2}mv^2 &= h\upsilon - W_s \\ \frac{1}{2}mv^2 &= eV_0 + eV \end{aligned}\right\} \Longrightarrow V_0 = \frac{h\upsilon}{e} - \frac{(W_s + eV)}{e}$$



2. 3) Effet Compton (1922)

Compton étudie la diffusion des ondes Electromagnétiques (EM) (rayons X) par la matière

Lorsqu'un faisceau de rayon X attaque une cible d'électrons libres (au repos) ces derniers se mettent en mouvement alors que les rayons X changent de longueur d'onde et de direction.



Avant la diffusion   Après la diffusion

2.3.a) Observation expérimentale :

L'onde réfléchie est de fréquence différente, de longueur différente (λ') que l'onde incidente (λ), λ**'** > λ

Traitement relativiste vitesse v ≈ c

iii) La relation de **Compton**

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1-\cos(\theta)) = \lambda_C(1-\cos(\theta))$$

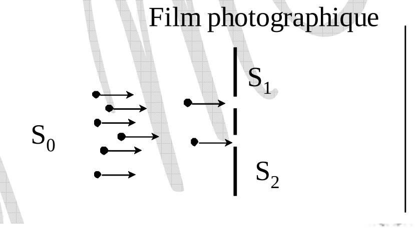
$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2{,}43 10^{-12}\,\text{m} = 2{,}43\,\text{pm}$$

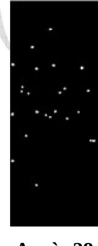
Longueur d'onde **Compton** de l'é

3) Aspects ondulatoires des particules

Les particules sont des ondes

3.1) Interférence : Particules d'électrons





Après 28 électrons



Après 100 électrons

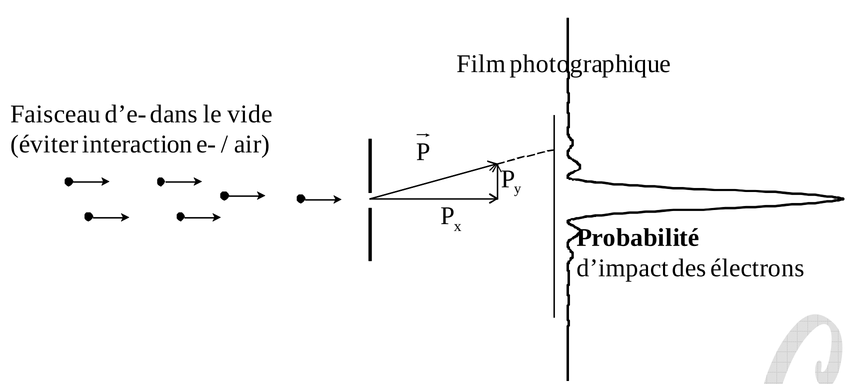


Après 10 000 électrons

Résultat expérimental similaire à celui observé pour les photons

Existence d'interférences : distribution des **électrons** donnée par la théorie de l'interférence entre ondes EM

3.2) Diffraction des électrons



Solution : le concept de fonction d'onde

Les impacts semblent être détectés à certains endroits plutôt qu'à d'autres. Tout se passe comme si *quelque chose favorisait la détection d'impacts*

Notons ce quelque chose $\psi_1(x)$ si S_1 est ouvert et $\psi_2(x)$ si S_2 est ouvert Alors on peut concevoir que si S_1 et S_2 sont ouvertes, ce quelque chose prend la forme $\psi_1(x) + \psi_2(x)$

Par *analogie optique :* La probabilité de détection varie comme $|\psi(x)|^2$ (densité de probabilité de présence)

Les interférences résultent de l'annulation de $|\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2$

Les valeurs de la fonction d'onde $\psi(x)$ obéissent à une équation présentant des similarités avec l'électromagnétisme.

En généralisant : $\Psi(\vec{r}, t)$ pour décrire une variation spatio-temporelle quelconque.

On imposera **pour un système à une particule :**

(Normalisation de la fonction d'onde)

$$\int_{\text{espace}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

L'électron se comporte comme une onde

Donc une particule ponctuelle de masse m = onde $\Psi(\vec{r}, t)$

La Notion de trajectoire est inadéquate (insuffisante) il sera remplacé par la fonction d'onde $\psi(x, t)$

Sa norme est la probabilité de présence $|\psi(x, t)|^2$: densité de probabilité de présence à l'instant t

$|\psi(x, t)|^2$ probabilité de présence entre x et x+dx à l'instant t

Ondes de De Broglie 1924

Une particule libre de masse **m** au repos, d'énergie total **E** et d'impulsion p, sera décrite par une onde (de De Broglie) dont la longueur d'onde λ telle que :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\,v}$$

$$\begin{cases} E = \hbar\omega = h\nu \\ P = mv = \hbar k = \hbar\dfrac{2\pi}{\lambda} = h\dfrac{2\pi}{\lambda} \end{cases}$$ Relation de la Dualité

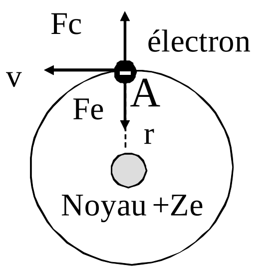
Pour une particule relativiste, la longueur d'onde de De Broglie est donnée par

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\,v} = \lambda = \frac{h}{m_0\,v}\sqrt{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}$$

4) Quantification de l'énergie atomique

4. 1) Atome de Bohr

L'électron gravitant autour du noyau de charge Ze sur une orbite circulaire de rayon r, est soumis à deux forces égales et opposées



$$Fe = k\frac{Ze^2}{r^2} \quad \text{Force électrostatique}$$

$$Fc = \frac{m_e v^2}{r} \quad \text{Force centrifuge}$$

Équilibre $\quad k\frac{Ze^2}{r^2} = m_e\frac{v^2}{r}$

$Fc = Fe$

$$k\,Ze^2 = m_e v^2 r \ (1)$$

m_e : masse de l'électron **= 9,1094.10^{-31} kg**

$k = 9\ \ 10^9$ S. I. dans le vide ou dans l'air

$$k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$$

4.2) Hypothèses de Bohr

i) Les orbites accessibles à l'électron ont des rayons donnés par

$$r_n = \frac{n\hbar}{m_e v} \ (2)$$

n est un nombre entier positif : nombre quantique

Le moment cinétique de l'électron dans ce cas s'écrit

$$\vec{\sigma}(e) = \vec{r}_n \wedge m_e\vec{v}$$

Soit en tenant compte de i)

$$\sigma_n = m_e v\, r_n = n\hbar \ \ (3)$$

Le module mvr ne prend que des valeurs entières de $\frac{h}{2\pi} = \hbar$

4.3) Energie de l'électron E = Ec +Ep : énergie de liaison

$$Ec = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{r}$$

$$Ep = e^-.V = e^-.k\frac{Ze}{r} = -k\frac{Ze^2}{r}$$

Ep = Energie potentiel crée par le noyau de charge Ze en un point distant de r

$$E = Ec + Ep = \frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{r} - k\frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{r} \ (4)$$ est l'énergie de liaison de l'électron

$$(3)^2/(1) = \ \frac{(m_e v\, r_n)^2}{m_e v^2 r_n} = \frac{(n\hbar)^2}{k\,Ze^2}$$

Soit

$$\frac{1}{r_n} = \frac{4\pi^2 kZe^2 m_e}{n^2 h^2}$$

D'ou

$$r_n = n^2\frac{h^2}{4\pi^2 kZe^2 m_e} = n^2\, a_0$$

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 kZe^2 m_e} = 53x10^{-12}\,m = 53pm$$

Avec a_0 = 53 pm : rayon de Bohr

L'énergie

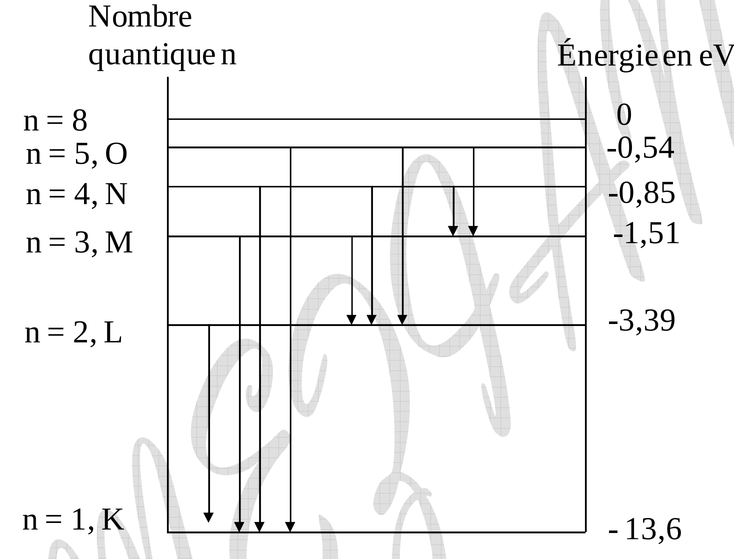
$$E = -\frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{n^2\dfrac{h^2}{4\pi^2 kZe^2 m_e}} = -\frac{1}{2}k\frac{Ze^2}{n^2 a_0}$$

Devient

$$E = -\frac{2\pi^2 m_e e^4 k^2}{h^2}\frac{Z^2}{n^2} = -E_0\frac{Z^2}{n^2}$$

Avec E_0 = 13,6 e.V

4.4) Niveaux d'énergies de l'atome Hydrogène



La longueur d'onde de l'énergie émise

Quand un électron passe d'un niveau initial Ei à un niveau final Ef, la quantité d'énergie émise où absorbée est donnée par :

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = |Ef\text{ - }Ei| = E_0 Z^2\left|\left(\frac{1}{ni^2} - \frac{1}{nf^2}\right)\right|$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \left|\frac{Ef\text{ - }Ei}{hc}\right| = \frac{E_0 Z^2}{hc}\left|\left(\frac{1}{ni^2} - \frac{1}{nf^2}\right)\right|$$

Soit

$$R_H = \frac{E_0 Z^2}{hc}$$

R_H La constante de Rydberg pour l'hydrogène $\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{ni^2} - \frac{1}{nf^2}\right)$

R_H =1,0967758 10^7 m^{-1}

5) Unités de la physique quantique

5.1) Unité de masse atomique (u. m. a = uma = u

$$1u.m.a = 1uma = \frac{1}{12}\text{ masse de l'atome } {}^{12}_{6}C$$

La masse d'1mole de carbone = 12 g = masse(Na atomes de carbone)

Une mole contient Na Atomes : Na nombre d'Avogadro = 6,022 10^{23}

$$\text{Masse(Na atome de } {}^{12}_{6}\text{C}) = 12\text{g}$$

$$1\text{u.m.a} = \frac{1}{12}\ \text{x}\ \frac{12\text{x}\,10^{-3}}{6{,}022\text{x}10^{23}} = 1{,}66054\text{x}10^{-27}\,\text{kg}$$

$$1\text{kg} = 6{,}02214\text{x}10^{26}\,\text{u.m.a}$$

Exemple
m_e = **9,1093897x10^{-31}** kg = 0,000 55 u ;
m_p = **1,6726231x10^{-27}** kg = 1,007 u;
m_n = **1,6749286x10^{-27}kg =**1,008 u .

5.2) Unité de longueur

Le mètre n'est pas une unité adaptée aux dimensions de l'atome, on utilise parfois le nanomètre (symbole : nm) tel que : **1 nm = 10^{-9} m**

1µm = 1 micro mètre = 10^{-6} m
1nm = 1 nano mètre = 10^{-9} m
1 Angström = 1Å = 10^{-10}m
1pm = pico mètre = 10^{-12} m
1 Fermi = 1 F = 10^{-15} m

L'atome d'hydrogène a pour dimensions :
Diamètre du noyau: d_n = 2,4 F =2,4x10^{-15}m.
Diamètre de l'atome: d_a = 1,1Å =1,1x10^{-10}m.

5.3) Unité de temps

La seconde est aussi une unité de mesure très grande pour d´écrire la durée de certains phénomènes nucléaire (temps de relaxation, durée de vie des états excités, temps de recombinaison,).

On utilise alors les sous multiples de la seconde.

1ms = milliseconde = 10^{-3}s
1 µs =microseconde = 10^{-6}s
1ns = nanoseconde = 10^{-9}s
1ps = picoseconde = 10^{-12}s

5.4) Unité d'énergie

Electron-Volt (eV) (l'unité d'énergie utilisée en physique Quantique)
1eV = énergie acquise par un électron soumis à une différence de potentiel (d. d. p.) de 1V.
1eV = 1,6 10^{-19} C x 1V = 1,6 10^{-19} Joule

C'est donc une unité très faible.

Les multiples sont :

1 kilo eV = 1 keV = 10^{3}eV
1 Mega eV = 1MeV = 10^{6} eV,
1Géga eV = 1GeV = 10^{9}eV.

U =1V

Soit

$$1\,\text{Joule} = \frac{1}{1{,}6\text{x}10^{-19}} = \text{eV}\ .$$

6) Principe d'incertitude de Heisenberg

- ✓ **En physique classique**

  Notion de trajectoire

  On peut mesurer avec précession x et Px

- ➢ **En physique Quantique**

  La notion de trajectoire est remplacée par la fonction d'onde

  On ne peut pas mesurer avec autant de précision x et Px

Toute mesure sur un système quantique se traduit par une perturbation important de ce système.

Les concepts classiques cessent de s'appliquer quand :

Action caractéristique ≈ constante de Planck *h*

Avec

Action = longueur caractéristique x impulsion caractéristique

Action =Temps x énergie

Action $\geq \hbar$ *mécanique classique*

Action $\approx \hbar$ *mécanique quantique*

Principe d'incertitude entre la position et la quantité de mouvement

$$\Delta x.\ \Delta P_x \sim \hbar \quad \Delta y.\ \Delta P_y \sim \hbar \quad \Delta z.\ \Delta P_z \sim \hbar$$

En général

$$\Delta x.\Delta P_x \geq \hbar/2 \qquad \Delta y.\Delta P_y \geq \hbar/2 \qquad \Delta z.\Delta P_z \geq \hbar/2$$

Principe d'incertitude entre le temps et l'énergie

$$\Delta E.\ \Delta t \sim \hbar \quad \Delta E.\Delta t \geq \hbar/2$$

Pr : J. Meziane

Chapitre II : La fonction d'onde de la matière et l'équation de Schrödinger

1) Ondes associées à la matière

1. 1) La dualité onde-corpuscule

Les particules ont un Aspect ondulatoire

$$\vec{P} = m\vec{v} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k = \frac{h}{\lambda}\vec{e}_k$$

$$E_{tot} = Ec + Ep = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega$$

Même dans le cas relativiste v ≈ c où

$$\vec{P} = m\vec{v} = \frac{m_0}{\sqrt{\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)}}\vec{k} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k = \frac{h}{\lambda}\vec{e}_k$$

$$E_{tot} = mc^2 = \sqrt{P^2c^2 + m_0^2c^4} = \hbar\omega$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{\left(1-\left(\frac{v}{c}\right)^2\right)}}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

λ : longueur d'onde
m : masse de particule
v : vitesse de la particule

$$h = 6.6261\ 10^{-34}\ J.\ s\ ;\ c = 3\ 10^8\ m/s \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

1. 3) La fonction d'onde de la matière

En Mécanique quantique la particule est décrite par une fonction d'onde Ψ(r, t). Son évolution est donnée par l'équation de Schrödinger.

Ψ(r, t) donne une description complète de l'état de la particule de masse *m* dans l'espace, à l'instant t.

Que représente Ψ(r, t) ?

En mécanique quantique, la fonction d'onde Ψ(r, t) représente notre connaissance de l'état du système.

- **Les fonctions d'ondes associées à la particule s'écrivent :**

$$\Psi(r, t) = \int_{R^3} g(k)\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\,\vec{r} - E\,t)} d^3k$$

Avec $E = E(P) = \hbar\omega = \frac{P^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$

Soit

$$\Psi(r, t) = \int_{R^3} g(P)\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\,\vec{r} - E\,t)} d^3P$$

Pour une dimension :

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{i(k\,x-\omega\,t)}dk$$

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty} g(P)\, e^{\frac{i}{\hbar}(P_x\,x-E\,t)}dP$$

- **L'existence de la particule dans l'espace :**

$$\left.\begin{array}{l}\int_{R^3}\|\Psi(r,t)\|^2 d^3r=1\\ \int_{R}\|\Psi(x,t)\|^2 dx=1\end{array}\right\}\Rightarrow \text{La particule de masse m existe dans l'espace}$$

$\Psi(r, t)$ est normée.

- **La densité de probabilité ρ(r) de trouver la particule au point r_0 est**

$$\rho(r_0) = \|\Psi(r_0, t)\|^2$$

$$\|\Psi(r_0,t)\|^2=\Psi(r_0,t)\Psi^*(r_0,t)\ \ (\Psi^* = \text{conjugué complexe de } \Psi)$$

- **La probabilité de trouver la particule dans le volume dV =** d^3r = dxdydz autour du point r au temps t.

$$\|\Psi(r,t)\|^2 d^3r$$

- **La probabilité de présence** de la particule dans un espace D autour de la position r

$$\text{Proba}(r\in D)=\int_D\|\Psi(r,t)\|^2 d^3r$$

- **La densité de probabilité** au point x_0 est $\rho(x_0) = \|\Psi(x_0, t)\|^2$
- **La probabilité de trouver la particule** autour du point x au temps t.

$$\|\Psi(x,t)\|^2 dx$$

- **La probabilité P(x_0) de trouver la particule entre** $-x_0$ et x_0.

$$P(x_0)=\int_{-x_0}^{x_0}|\Psi(x,t)|^2 dx$$

2) Equation de Schrödinger

a) Equation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t)= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\Psi(r,t)+V(r)\,\Psi(r,t)=E\Psi(r,t)$$

m la masse de la particule,
V(r) l'énergie potentielle de la particule au point r,
Δ est le Laplacien.

$$\hbar=\frac{h}{2\pi}= 1{,}05457\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

Où bien

$$\hat{H}\,\psi = E\psi$$

Equation aux valeurs propres de H

où E est l'énergie de la particule.
Où H est l'opérateur associé à l'énergie : appelée **opérateur hamiltonien** du système ou plus souvent **hamiltonien**

$$\hat{H}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\ +V(r)$$

b) Equation de Schrödinger indépendante du temps : solution stationnaire

Pour chercher une solution qui ne dépend pas du temps (solution stationnaire) :

L'énergie ne dépend pas du temps $\frac{\partial E}{\partial t} = 0$

Et de même pour son hamiltonien ➔ $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$

Système stable isolé

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = E\,\Psi(r,t) \;\Rightarrow\; \frac{d\Psi}{\Psi} = \frac{E}{i\hbar}dt \;\Rightarrow\; \Psi(r,t) = A(r)\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

A t = 0

$$\Psi(r,0) = A(r) = \varphi(r) \;\Rightarrow\; \Psi(r,t) = \Psi(r,0)\; e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \varphi(r)\; e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$$|\Psi(r,t)|^2 = \Psi^*(r,t)\,\Psi(r,t) = \varphi^*(r)\;\varphi(r)$$

Ψ^* est le conjugué complexe de Ψ

Indépendante du temps ➔ Etat stationnaire

L'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,t) + V(r)\,\Psi(r,t)$$

Pour

$$\Psi(r,t) = \varphi(r)\; e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

Donne

$$E\,\varphi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\varphi(r) + V(r)\,\varphi(r) \quad \text{Equation de Schrödinger indépendante du temps}$$

$$\hat{H}\varphi(r) = E\,\varphi(r) \quad \text{Equation aux valeurs propres}$$

E : valeur propre de $\hat{H}$

$\Phi(r)$: vecteur propre de $\hat{H}$

c) Principe de correspondance : à tout grandeur physique mesurable est associé un opérateur qui agit sur la fonction d'onde comme suite

$$\begin{cases} E = Ec + Ep \rightarrow \hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{P} = m\vec{v} \rightarrow \hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla} \\ P_x \rightarrow \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \\ r \rightarrow R \\ x \rightarrow X \end{cases} \qquad \begin{cases} \hat{H}\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = E\Psi(r,t) \\ \hat{\vec{P}}\Psi(r,t) = -i\hbar\vec{\nabla}\Psi(r,t) \\ \hat{P}_x\Psi(r,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(r,t) \\ R\Psi(r,t) = r\Psi(r,t) \\ X\Psi(r,t) = x\Psi(r,t) \end{cases}$$

H : Hamiltonien ➔ Opérateur énergie

$$\hat{P}_x\Psi(r,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(r,t) = -i\hbar\frac{i}{\hbar}P_x\Psi(r,t) = p_x\Psi(r,t)$$

p_x est la valeur propre de l'opérateur $\hat{P}_x$

$$\hat{H}\,\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = i\hbar\frac{i}{\hbar}E\Psi(r,t) = E\Psi(r,t)$$

E est la valeur propre de l'opérateur $\hat{H}$

$$\hat{P}^2\ \Psi(r,t) = -\hbar^2\Delta\Psi(r,t) = p^2\Psi(r,t)$$

p^2 est la valeur propre de l'opérateur $\hat{P}^2$

d) Equation de Schrödinger : Procédure générale

1) Déterminer l'énergie totale de la particule :

$$E = Ec + Ep \Rightarrow E = \frac{1}{2}mv^2 + V(r)$$

2) Trouver une relation entre l'énergie et la quantité de mouvement p = mv

$$E = \frac{P^2}{2m} + V(r)$$

3) Appliquer le principe de correspondance

$$\begin{cases} E = Ec + Ep \rightarrow \hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{P} = m\vec{v} \rightarrow \hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla} \\ P_x \rightarrow \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \\ r \rightarrow R \\ x \rightarrow X \end{cases}$$

4) Remplacer chaque grandeur par son opérateur équivalent

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)^2}{2m} + V(R) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(R)$$

Soit à une seule dimension

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2}{2m} + V(X) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(X)$$

5) Appliquer l'équation obtenue en (4) à une fonction d'onde

Soit $\Psi(\vec{r},t)$ la fonction d'onde associée à la particule.

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(R)\Psi(\vec{r},t) = E\Psi(\vec{r},t)$$

Soit à une seule dimension

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(X)\Psi(x,t) = E\Psi(x,t) \quad (5)$$

6) Dans le cas d'un système stationnaire

L'énergie ne dépend pas du temps $\frac{\partial E}{\partial t} = 0$

Et de même pour son hamiltonien $\Rightarrow \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$

L'équation (5) s'écrit :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(R)\Psi(\vec{r},t) = E\Psi(\vec{r},t)$$

Où

$$\Psi(r,t) = e^{-i\frac{E\,t}{\hbar}}\varphi(r)$$

Soit

$$\hat{H}\varphi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(r) + V(R)\varphi(r) = E\,\varphi(r)$$

Où encore :

$$E\,\varphi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\varphi(r) + V(R)\,\varphi(r)$$ Equation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}\varphi(r) = E\,\varphi(r)$$ Equation aux valeurs propres

E : valeur propre de $\hat{H}$

$\Phi(r)$: vecteur propre de $\hat{H}$

Chapitre III : Etude de quelques systèmes quantiques : Etats stationnaires

a) Équation de Schrödinger indépendante du temps

Cas d'une particule plongé dans un potentiel V(r)

i) Son énergie totale :

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

ii) Sa quantité de mouvement (son impulsion) p = m v

Son Hamiltonien

$$H(R,P) = \frac{P^2}{2m} + V(R)$$

On fixe E, on calcule les fonctions propres (états stationnaires) d'une particule soumise à un potentiel V(r)

En utilisant le principe de correspondance

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(R)$$

L'équation de Schrödinger devient

$$H\varphi(r) = E\varphi(r)$$

$$E\varphi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(r) + V(R)\varphi(r)$$

Equation de Schrödinger indépendante du temps

Equation de Schrödinger stationnaire

Soit

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(r) + (E - V(R))\varphi(r) = 0$$

Pour une seul dimension

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + (E - V(X))\varphi(x) = 0$$

2) Exemples de calcul de ψ à une dimension ψ(x, t)

2.1) Particule dans un puits de potentiel : Boite quantique

On considère une particule enfermée dans une boite unidimensionnelle.

Ce système est décrit par le potentiel suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{Pour } 0 \le x \le L \\ \infty, & \text{Pour } x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

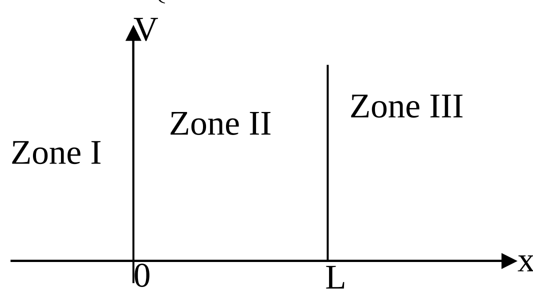


Fig. 2.1-Puit de potentiel

L'énergie totale

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

L'équation de Schrödinger stationnaire est

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+(E-V(x))\varphi(x)=0$$

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois zones.

Dans la zone II, V (x) = 0 ➔ l'équation de Schrödinger devient

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+E\varphi(x)=0$$

On remplaçant E par sa valeur

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi(x)=0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+k^2\varphi(x)=0$$

La solution, exprimée avec les fonctions cosinus et sinus, est

φ(x)= C sin(kx) + D cos(kx) dans la zone II

et l'énergie qui lui correspond est

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

Dans les zones I et III

A cause des murs de potentiel infiniment hauts en x = 0 et x = L, la particule ne peut pas se trouver à l'extérieur de l'intervalle [0, L]

Sa fonction d'onde doit donc nécessairement s'annuler dès que x atteint les bornes de l'intervalle.

φ(x) = 0 dans les zones I et III

Nous avons donc

$$\varphi(x)=\begin{cases}C\sin(kx)+D\cos(kx),\ 0\le x\le L\\ 0,\ x<0 \text{ et } x>L\end{cases}$$

La fonction φ(x) est une fonction continue en x = 0 et x = L.

La condition de continuité en x = 0 ➔ que D vaut 0.

En effet

$$\varphi(0^+)=\varphi(0^-)=0 \Rightarrow\ D=0$$

La condition de continuité en x = L donne C doit être ≠ 0. Si non φ(x) sera nul

$$\varphi(L^-)=C\sin(kL)=\varphi(L^+)=0$$

$$kL=n\pi \ \text{➔}\ k=\frac{n\pi}{L}$$

Le vecteur k ne peut prendre que des valeurs discrètes nπ/L.

L'impulsion correspondante p vaut

$$p=p_n=\hbar k=\hbar\frac{n\pi}{L}$$

On dit alors que k et p sont quantifiés. La quantification de k implique donc aussi la quantification de l'énergie E de la particule :

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{2m.L^2}=\frac{h^2n^2}{8m.L^2}$$

E varie comme n^2 ➔ L'énergie est aussi quantifiée.

Normalisation de la fonction d'onde dans la zone II

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} C\sin(\frac{n\pi}{L}x)\,, 0 \le x \le L \\ 0,\ x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

La condition de normalisation de la fonction d'onde est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\varphi(x)\|^2\,dx = \int_0^L \|\varphi(x)\|^2\,dx = \int_0^L \|C\|^2 \sin^2(\frac{n\pi}{L}x)dx$$

$$\cos(2a) = \cos^2(a) - \sin^2(a) = 2\sin^2(a) - 1 = -2\cos^2(a)$$

$$\int_0^L \|C\|^2 \sin^2(\frac{n\pi}{L}x)dx = \frac{\|C\|^2}{2}\left(\int_0^L dx + \int_0^L \cos(2\frac{n\pi}{L}x)dx\right) = 1$$

$$\|C\|^2 \frac{L}{2} = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

La fonction d'onde normalisée est donc

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x)\,, 0 \le x \le L \\ 0,\ x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

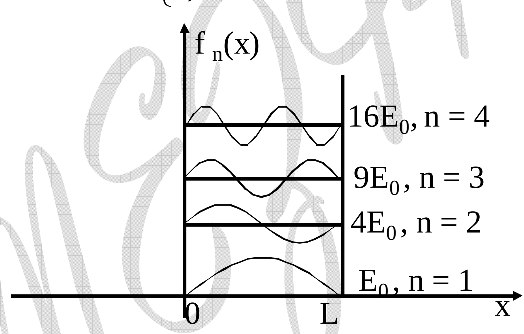


Fig. 2.2 – Etats propre $f_n(x)$ placées verticalement

La densité de probabilité $\|\varphi(x)\|^2$ vaut

$$\|\varphi_n(x)\|^2 = \begin{cases} \frac{2}{L}\sin^2(\frac{n\pi}{L}x)\,, 0 \le x \le L \\ 0,\ x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

2.3) Barrière de potentielle : Effet tunnel

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0,\ 0 \le x \le L \\ 0,\ x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

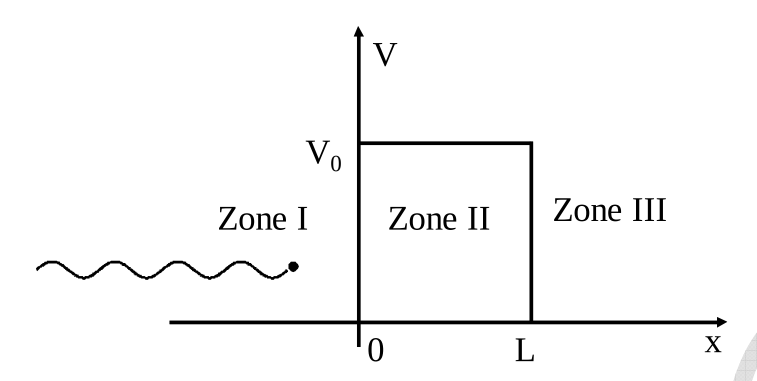


Fig. 2.3 – Effet tunnel

Envisageant le cas d'une particule incidente depuis la gauche
Une particule arrive depuis x < 0 (depuis -∞) sur la barrière de potentiel V_0
Résolvons le problème dans le cadre de la mécanique quantique.

L'énergie totale

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x)$$

L'équation de Schrödinger stationnaire est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + (V(x) - E)\varphi(x) = 0$$

En multipliant par(-1)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + (E - V(x))\varphi(x) = 0$$

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois zones I, II et III.

a)Dans la zone I et III, v(x) = 0 ;
l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + E\varphi(x) = 0$$

E est l'énergie de la particule :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

On remplaçant E par sa valeur

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi(x) = 0$$

En devisant par $\frac{\hbar^2}{2m}$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + k^2\varphi(x) = 0$$

La solution est

$$\varphi_I(x) = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$
$$\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx)$$

k est donné par :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

B_3 vaut 0 car dans la zone III, il n'y a pas de particule allant dans la direction négative.

$$\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(ikx)$$

b) Dans la zone II.

L'équation de Schrödinger est

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + (E - V_0)\,\varphi(x) = 0$$

b.1) Cas E < V_0 ➔ (E - V_0) < 0 : Effet tunnel

L'énergie E de la particule est inférieure à V_0. En mécanique classique, la particule est réfléchie par la barrière de potentiel.

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Soit

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) - K^2\varphi(x) = 0$$

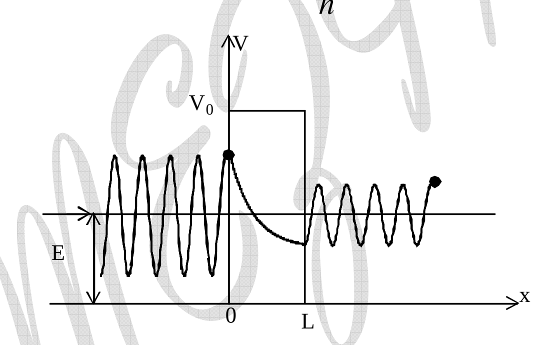
Où

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

La solution est :

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(Kx) + B_2 \exp(-Kx)$$

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



On défini

$\|A_1\|^2$ donne la probabilité de la particule allant de gauche à droite.

$\|A_3\|^2$ donne la probabilité de trouver la particule dans la zone III.

Soit le rapport $r = B_1/A_1$ coefficient de réflexion en amplitude dans la zone I.

Soit le rapport $t = A_3/A_1$ coefficient de transmission en amplitude.

Appelons le rapport $R = \|B_1\|^2/\|A_1\|^2$ coefficient de réflexion dans la zone I.

Appelons le rapport $T = \|A_3\|^2/\|A_1\|^2$ coefficient de transmission de la zone I à la zone III en traversant la barrière de potentiel.

Nous devons imposer la continuité de en x = 0 et x = L, ainsi que la continuité de (dφ/dx) en x = 0 et x = L. Donc

$$\begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \\ \dfrac{d\varphi_I}{dx}(0) = \dfrac{d\varphi_{II}}{dx}(0) \\ \dfrac{d\varphi_{II}}{dx}(L) = \dfrac{d\varphi_{III}}{dx}(L) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 \exp(KL) + B_2\exp(-KL) = A_3\exp(ikL) \\ ikA_1 - ikB_1 = KA_2 - KB_2 \\ KA_2 \exp(KL) - KB_2\exp(-KL) = ikA_3\exp(ikL) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = K(A_2 - B_2) \\ A_2 \exp(KL) + B_2 \exp(\text{-}KL) = A_3 \exp(ik_1 L) \\ KA_2 \exp(KL) - KB_2 \exp(\text{-}KL) = ik_1 A_3 \exp(ik_1 L) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_2 = \frac{A_1}{2}(\frac{K+ik_1}{K}) + \frac{B_1}{2}(\frac{K-ik_1}{K}) \\ B_2 = \frac{A_1}{2}(\frac{K-ik_1}{K}) + \frac{B_1}{2}(\frac{K+ik_1}{K}) \\ A_2 = \frac{A_3}{2}(\frac{K+ik_1}{K})\exp(ik_1 L\text{ - }KL) \\ B_2 = \frac{A_3}{2}(\frac{K-ik_1}{K})\exp(ik_1 L + KL) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_3(K+ik_1)\exp(ik_1 L\text{ - }KL) = A_1(K+ik_1) + B_1(K-ik_1) \\ A_3(K-ik_1)\exp(ik_1 L + KL) = A_1(K-ik_1) + B_1(K+ik_1) \end{cases}$$

En divisant le premier par $A_1(K+ik_1)$ et le second par $A_1(K - ik_1)$

$$\begin{cases} t\exp(ik_1 L\text{ - }KL) = 1 + r\,\frac{K-ik_1}{K+ik_1} \\ t\exp(ik_1 L + KL) = 1 + r\,\frac{K+ik_1}{K-ik_1} \end{cases}$$

Où $t = A_3/A_1$ et $r = B_1/A_1$

En multipliant le premier par $(K+ik_1)/(K-ik_1)$ et le second par $(K - ik_1)/(K+ik_1)$

$$\begin{cases} \frac{K+ik_1}{K-ik_1}\,t\exp(ik_1 L\text{ - }KL) = \frac{K+ik_1}{K-ik_1} + r \\ \frac{K-ik_1}{K+ik_1}\,t\exp(ik_1 L + KL) = \frac{K-ik_1}{K+ik_1} + r \end{cases}$$

$$t\left(\frac{K+ik_1}{K-ik_1}\exp(ik_1 L\text{ - }KL) - \frac{K-ik_1}{K+ik_1}\exp(ik_1 L + KL)\right) = \frac{K+ik_1}{K-ik_1} - \frac{K-ik_1}{K+ik_1}$$

En multipliant par $(K+ik_1)$ $(K - i\,k_1)$

$$t = \frac{4ik_1 K}{(K+ik_1)^2\exp(ik_1 L\text{ - }KL) - (K-ik_1)^2\exp(ik_1 L + KL)}$$

$$t = \frac{4ik_1 K}{\exp(ik_1 L)}\,\frac{1}{(K+ik_1)^2\exp(\text{-}K\,L) - (K-ik_1)^2\exp(KL)}$$

$$t = \frac{2ik_1 K}{\exp(ik_1 L)}\,\frac{1}{-(k_1^2 - K_2^2)\sinh(KL) + 2ik_1 K\cosh(KL)}$$

$$T = \|t\|^2 = \frac{\|A_3\|^2}{\|A_1\|^2} = \frac{4k_1^2 K_2^2}{(k_1^2 + K_2^2)^2\sinh^2(KL) + 4k_1^2 K_2^2}$$

$$T = \frac{\|A_3\|^2}{\|A_1\|^2} = \left(1 + \frac{[\exp(\text{-}KL) - \exp(KL)]^2}{4\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\right)^{-1}$$

Le fait que T soit non nul montre qu'il y a une probabilité non nulle pour que la particule traverse la barrière de potentiel et ressorte dans la zone III.

Et cela malgré que l'énergie cinétique des électrons E < V_0

C'est ce qu'on appelle **l'effet tunnel.**

Pour KL >> 1

$$T = 4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\exp(-2KL)$$

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

L'effet tunnel décroît exponentiellement avec L et $m^{1/2}$.

Les particules légères comme les électrons ont une probabilité plus grande de faire un effet tunnel que les particules plus lourdes.

b.2) Cas E > V_0

Dans la zone II. L'équation de Schrödinger est

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+(E-V_0)\varphi(x)=0$$

La solution est :

$$\varphi_{II}(x) = A_2\exp(ik_2x) + B_2\exp(-ik_2Kx)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Dans la zone I et III La solution est :

$$\varphi_I(x) = A_1\exp(ik_1x) + B_1\exp(-ik_1x)$$

$$\varphi_{III}(x) = A_3\exp(ik_1x)$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2^2 + k_1^2 = \frac{4mE}{\hbar^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$k_2^2 - k_1^2 = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$k_1k_2 = \frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{E(E-V_0)}$$

Nous devons imposer la continuité de en x = 0 et x = L, ainsi que la continuité de (dφ/dx) en x = 0 et x = L. Donc

$$\begin{cases} \varphi_{I}(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \\ \dfrac{d\varphi_{I}}{dx}(0) = \dfrac{d\varphi_{II}}{dx}(0) \\ \dfrac{d\varphi_{II}}{dx}(L) = \dfrac{d\varphi_{III}}{dx}(L) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 \exp(ik_2L) + B_2\exp(-ik_2L) = A_3\exp(ik_1L) \\ ik_1A_1 - ik_1B_1 = ik_2A_2 - ik_2B_2 \\ ik_2A_2 \exp(ik_2L) - ik_2B_2\exp(-ik_2L) = ik_1A_3\exp(ik_1L) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2) \\ A_2 \exp(ik_2L) + B_2\exp(-ik_2L) = A_3\exp(ik_1L) \\ ik_2A_2 \exp(ik_2L) - ik_2B_2\exp(-ik_2L) = ik_1A_3\exp(ik_1L) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_2 = \dfrac{A_1}{2}(\dfrac{k_2+k_1}{k_2}) + \dfrac{B_1}{2}(\dfrac{k_2-k_1}{k_2}) \\ B_2 = \dfrac{A_1}{2}(\dfrac{k_2-k_1}{k_2}) + \dfrac{B_1}{2}(\dfrac{k_2+k_1}{k_2}) \\ A_2 = \dfrac{A_3}{2}(\dfrac{k_2+k_1}{k_2})\exp(i(k_1 - k_2)L) \\ B_2 = \dfrac{A_3}{2}(\dfrac{k_2-k_1}{k_2})\exp(i(k_1 + k_2)L) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_3(k_2+k_1)\exp(i(k_1 - k_2)L) = A_1(k_2+k_1) + B_1(k_2-k_1) \\ A_3(k_2-k_1)\exp(i(k_1 + k_2)L) = A_1(k_2-k_1) + B_1(k_2+k_1) \end{cases}$$

En divisant le premier par $A_1(k_2+k_1)$ et le second par $A_1(k_2 - k_1)$

$$\begin{cases} t\exp(i(k_1 - k_2)L) = 1 + r\dfrac{k_2-k_1}{k_1+k_2} \\ t\exp(i(k_1 + k_2)L) = 1 + r\dfrac{k_2+k_1}{k_2-k_1} \end{cases}$$

En multipliant le premier par $(k_2+k_1)/(k_2 - k_1)$ et le second par $(k_2 - k_1)/(k_2+k_1)$

$$\begin{cases} \dfrac{k_2+k_1}{k_2-k_1} t\exp(i(k_1 - k_2)L) = \dfrac{k_2+k_1}{k_2-k_1} + r \\ \dfrac{k_2-k_1}{k_1+k_2} t\exp(i(k_1 + k_2)L) = \dfrac{k_2-k_1}{k_1+k_2} + r \end{cases}$$

$$t\left(\frac{k_2+k_1}{k_2-k_1}\exp(i(k_1 - k_2)L) - \frac{k_2-k_1}{k_1+k_2}\exp(i(k_1 + k_2)L)\right) = \frac{k_2+k_1}{k_2-k_1} - \frac{k_2-k_1}{k_1+k_2}$$

En multipliant par $(k_2+k_1)(k_2 - k_1)$

$$t = \frac{4k_1k_2}{(k_2+k_1)^2\exp(i(k_1 - k_2)L) - (k_2-k_1)^2\exp(i(k_1 + k_2)L)}$$

$$t = \frac{4k_1k_2}{\exp(ik_1L)}\frac{1}{(k_2+k_1)^2\exp(-ik_2L) - (k_2-k_1)^2\exp(ik_2L)}$$

$$T = \|t\|^2 = \frac{\|A_3\|^2}{\|A_1\|^2} = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2\sin^2(k_2L)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{\sin^2(k_2L)}{4\dfrac{E}{V_0}\left(\dfrac{E}{V_0} - 1\right)}}$$

T max ➔T = 1 pour

$$\sin^2(k_2L) = 0$$

Donc

$$k_2L = n\pi \Rightarrow k_2 = \frac{n\pi}{L}$$

Transmission complète (T = 1) pour $k_2L = n\pi$.
T minimale ➔ T_m

$$\sin^2(k_2L) = 1$$

$$k_2L = (2n+1)\frac{\pi}{2}$$

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}$$

Transmission en fonction de l'énergie de la particule :

$$T = \begin{cases} \dfrac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(KL)} \text{ pour } E < V_0 \\ \dfrac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k_2L)} \text{ pour } E > V_0 \end{cases}$$

2.4) Marche de potentiel

$$V(x) = \begin{cases} V_0, x > 0 \\ 0, x < 0 \end{cases}$$

Fig. 2.4 –Barrière de potentiel

Soit une particule d'énergie cinétique, en x < 0, égale à :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 > V_0$$

Du point de vue classique, la situation est simple : la particule passe par dessus la barrière en venant de x < 0.

Qu'en est-il du point de vue quantique ?

Dans la zone I, nous avons vu que

$$\varphi_I(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x)$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Notez que nous avons pris la solution générale, superposition d'une onde progressive $\exp(ik_1x)$ et d'une onde rétrograde $\exp(-ik_1x)$

Dans la zone II, l'équation de Schrödinger est

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+(E-V_0)\varphi(x)=0$$

- **cas $(E-V_0) > 0$**

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(ik_2x)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Nous prenons ici seulement onde progressive $\exp(ik_2x)$ car dans la zone II, la particule se propage vers les x croissants.

Les conditions imposées en x = 0 sont

$$\begin{cases}\varphi_I(0)=\varphi_{II}(0)\\ \frac{d\varphi_I}{dx}(0)=\frac{d\varphi_{II}}{dx}(0)\end{cases}$$

$$\begin{cases}A_1+B_1=A_2\\ k_1(A_1-B_1)=k_2A_2\end{cases}$$

Comme dans le cas examiné pour l'effet tunnel, on note que B_1 et A_2 peuvent être calculés en fonction de A_1.

$$\begin{cases}B_1-A_2=-A_1\\ k_1B_1+k_2A_2=k_1A_1\end{cases}$$

Les solutions sont

$$\begin{cases}B_1=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A_1\\ A_2=\frac{2k_1}{k_1+k_2}A_1\end{cases}$$

On définit le coefficient de réflexion R comme :

$$R=\frac{\|B_1\|^2}{\|A_1\|^2}=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$$

et le coefficient de transmission T comme :

$$T=1-R=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$R+T=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}+\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}=1$$

Discussion physique

Cas classique : La particule passe par dessus la barrière de potentiel. Il n'y a rien de semblable à une réflexion.

Cas quantique : Même si E > V0, une partie de l'onde incidente est réfléchie.

Classiquement la probabilité de réflexion est nulle.

En mécanique quantique

$$\begin{cases}R\to 0\\ T\to 1\end{cases} E>>V_0 \Rightarrow (k_1\to k_2)$$

- **cas $(E-V_0) < 0$**

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(-K_2x)+ B_2 \exp(K_2x)$$

$$K_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

L'onde est nulle à l'infini ➔ $B_2 = 0$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(-K_2 x)$$

Les conditions imposées en x = 0 sont

$$\begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \frac{d\varphi_I}{dx}(0) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = -K_2 A_2 \end{cases}$$

Comme dans le cas examiné pour l'effet tunnel, on note que B_1 et A_2 peuvent être calculés en fonction de A_1.

$$\begin{cases} B_1 - A_2 = -A_1 \\ k_1 B_1 + iK_2 A_2 = k_1 A_1 \end{cases}$$

Les solutions sont

$$\begin{cases} B_1 = \frac{k_1 - iK_2}{k_1 + iK_2} A_1 \\ A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + iK_2} A_1 \end{cases}$$

On définit le coefficient de réflexion R comme :

$$R = \frac{\|B_1\|^2}{\|A_1\|^2} = \frac{\|k_1 - iK_2\|^2}{\|k_1 + iK_2\|^2} = 1$$

Le flux de transmission est nul

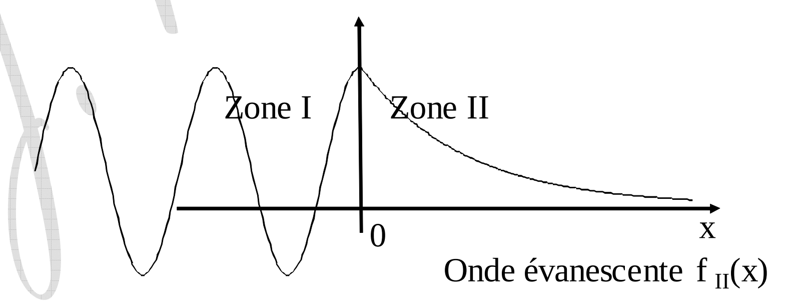
$$T = 1 - R = 0$$

Discussion physique

il n'y a pas de particule transmis

Conclusion

La théorie quantique est plus tolérante que la théorie classique en ceci qu'elle autorise la présence d'une particule en certaines zones où, classiquement, l'énergie cinétique serait négative et la présence d'une particule impossible. Mais cette tolérance est **locale** et ne s'étend pas à l'ensemble de l'espace : une particule ne peut se trouver dans un état où l'énergie cinétique classique serait **partout** négative.



2.5) P articule dans un puits de potentiel fini

$$V(x) = \begin{cases} 0, -L \le x \le L \\ V_0, x < -L \text{ et } x > L \end{cases}$$

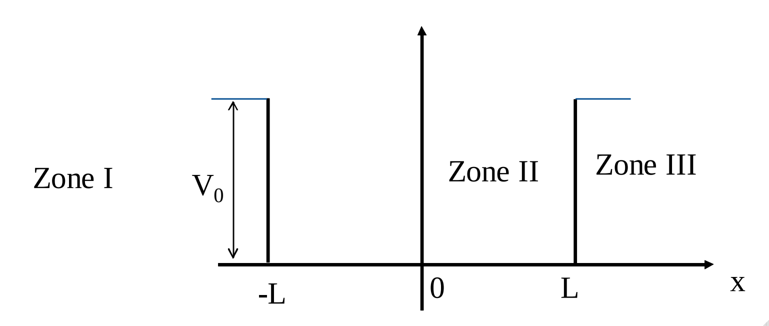


Fig. 2.1 – Puits de potentiel fini

- A l'extérieur du puits : $|x| > L$ *:* Dans les zones I et III.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + (E - V_0)\varphi(x) = 0$$

✓ ***E < V₀***

Lorsque V_0 *est supérieur à E, tout mouvement de la particule est interdit en dehors du* segment]−*L*, *L*[*. La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment* de droite de longueur 2L *où elle est confinée.*

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (I), (II) et (III) où agit le potentiel :

Dans les régions (I) et (III) V(x) = V₀

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) - K^2\varphi(x) = 0$$

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Les solutions sont :

$$\varphi_I(x) = A_1 \exp(Kx) + B_1 \exp(-Kx)$$
$$\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(Kx) + B_3 \exp(-Kx)$$

Comme $\phi(x)$ *doit être bornée dans les régions (I) et (III), on a nécessairement :*

$$A3 = B1 = 0.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\|\varphi_I(x)\|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\|\varphi_{III}(x)\|^2\,dx = 1$$

Les conditions aux limites en = ±∞ nécessitent que nous posions

$A_3 = 0$ pour $x > L$ et $B_1 = 0$ pour $x < -L$

✓ **A l'intérieur du puits : |*x*| < *L dans la zone II : V(x) =0***

L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + k^2\varphi(x) = 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(ikx) + B_2 \exp(-ikx)$$

En résumé les solutions sont

$$\begin{cases} \varphi_{I}(x) = A_1 e^{Kx} \\ \varphi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \\ \varphi_{III}(x) = B_3 e^{-Kx} \end{cases}$$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = -L$ *et* $x = +L$:

x = -L

$$\begin{cases} \varphi_{I}(-L^-) = \varphi_{II}(-L^+) \\ \frac{d\varphi_{I}}{dx}(-L^-) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(-L^+) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{-KL} = A_2 e^{-ikL} + B_2 e^{ikL} \text{(xik) (xK)} \\ KA_1 e^{-KL} = ikA_2 e^{-ikL} - ikB_2 e^{ikL} \end{cases}$$

Comme pour l'effet tunnel, on note que B_2 et A_1 peuvent être calculés en fonction de A_2.

$$\begin{cases} 2ikA_2 e^{-ikL} = A_1 \left[ike^{-KL} + Ke^{-KL} \right] \\ B_2 \left[ike^{ikL} - Ke^{ikL} \right] = A_2 \left[ike^{-ikL} - Ke^{-ikL} \right] \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_2 = \frac{K + ik}{2ik} e^{(ik-K)L} A_1 \quad (1) \\ B_2 = \frac{ik - K}{2ik} e^{-(ik+K)L} A_1 \quad (2) \end{cases}$$

x = L

$$\begin{cases} \varphi_{II}(L^-) = \varphi_{III}(L^+) \\ \frac{d\varphi_{II}}{dx}(L^-) = \frac{d\varphi_{III}}{dx}(L^+) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B_3 e^{-KL} = A_2 e^{ikL} + B_2 e^{-ikL} \text{(xik) (xK)} \\ -KB_3 e^{-KL} = ikA_2 e^{ikL} - ikB_2 e^{-ikL} \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2ikA_2 e^{ikL} = B_3 \left[ike^{-KL} - Ke^{-KL} \right] \\ B_2 \left[ike^{-ikL} - Ke^{-ikL} \right] = A_2 \left[ike^{ikL} + Ke^{ikL} \right] \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 = \frac{ik - K}{2ik} e^{-(K+ik)L} B_3 \quad (3) \\ B_2 = \frac{ik + K}{2ik} e^{(ik-K)L} B_3 \quad (4) \end{cases}$$

$$(1) = (3) \Rightarrow \frac{K + ik}{2ik} e^{(ik-K)L} A_1 = \frac{ik - K}{2ik} e^{-(K+ik)L} B_3 \Rightarrow B_3 = \frac{K + ik}{ik - K} e^{2ikL} A_1 \quad (5)$$

$$t = \frac{B_3}{A_1} = \frac{K + ik}{ik - K} e^{2ikL}$$

$$T = \left\| \frac{B_3}{A_1} \right\|^2 = \frac{K^2 + k^2}{k^2 + K} = 1$$

$$R = 1 - T = 0$$

- ✓ ***E > V₀ ➔ E - V₀ > 0***

Dans les régions (I) et (III) $V(x) = V_0$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + k_1^2 \varphi(x) = 0$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Les solutions sont :

$$\varphi_{I}(x) = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)$$

$$\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(ik_1 x) + B_3 \exp(-ik_1 x)$$

Pas d'onde réfléchie dans III $B3 = 0$.

$$A3 = 0.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\varphi_{\mathrm{I}}(\mathrm{x})\|^2 \,\mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} \|\varphi_{\mathrm{III}}(\mathrm{x})\|^2 \,\mathrm{dx} = 1$$

En résumé la solution est

$$\begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(\mathrm{x}) = \mathrm{A}_1 e^{ik_1\mathrm{x}} + B_1 e^{-ik_1\mathrm{x}} \\ \varphi_{\mathrm{II}}(\mathrm{x}) = \mathrm{A}_2 e^{ik\mathrm{x}} + \mathrm{B}_2 e^{-ik\mathrm{x}} \\ \varphi_{\mathrm{III}}(\mathrm{x}) = \mathrm{A}_3 e^{ik_1\mathrm{x}} \end{cases}$$

$$\mathrm{k} = \frac{\sqrt{2\mathrm{mE}}}{\hbar}$$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = -L$ *et* $x = +L$:

En x = - L

$$\begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(-L^-) = \varphi_{\mathrm{II}}(-L^+) \\ \frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{I}}}{\mathrm{dx}}(-L^-) = \frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{dx}}(-L^+) \\ \varphi_{\mathrm{II}}(L^-) = \varphi_{\mathrm{III}}(L^+) \\ \frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{dx}}(L^-) = \frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{III}}}{\mathrm{dx}}(L^+) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathrm{A}_1 e^{-ik_1L} + B_1 e^{ik_1L} = \mathrm{A}_2 e^{-ikL} + \mathrm{B}_2 e^{ikL} \ (\mathrm{xik}) \\ ik_1\mathrm{A}_1 e^{-ik_1L} - ik_1 B_1 e^{ik_1L} = \mathrm{ikA}_2 e^{-\mathrm{ik}L} - \mathrm{ikB}_2 e^{\mathrm{ik}L} \\ \mathrm{A}_2 e^{ikL} + B_2 e^{-ikL} = \mathrm{B}_3 e^{ik_1L} \ (ik) \\ ik\mathrm{A}_2 e^{ikL} - ikB_2 e^{-ikL} = ik_1 \mathrm{B}_3 e^{ik_1L} \end{cases}$$

Soit

$$\begin{cases} 2\mathrm{ikA}_2 e^{-\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1(ik - ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} \\ 2\mathrm{ikB}_2 e^{-\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1(ik + ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} \\ \mathrm{B}_3(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} = 2\mathrm{ikA}_2 e^{\mathrm{ik}L} \\ \mathrm{B}_3(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} = 2\mathrm{ikB}_2 e^{-\mathrm{ik}L} \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2\mathrm{ikA}_2 e^{-\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1(ik - ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} \\ 2\mathrm{ikB}_2 e^{-\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1(ik + ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} \\ \mathrm{B}_3(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} = e^{2\mathrm{ik}L}\left(\mathrm{A}_1(ik - ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L}\right)\left(\mathrm{x}\frac{1}{e^{2\mathrm{ik}L}}\frac{1}{(ik + ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L}}\right) \\ \mathrm{B}_3(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L} = e^{-2\mathrm{ik}L}\left(\mathrm{A}_1(ik + ik_1)e^{-\mathrm{ik}_1L} + B_1(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L}\right)\left(\mathrm{x}\frac{1}{e^{-2\mathrm{ik}L}}\frac{1}{(ik - ik_1)e^{\mathrm{ik}_1L}}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathrm{B}_3 e^{-2\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1 \frac{(ik - ik_1)}{(ik + ik_1)} e^{-2\mathrm{ik}_1L} + B_1 \\ \mathrm{B}_3 e^{2\mathrm{ik}L} = \mathrm{A}_1 \frac{(ik + ik_1)}{(ik - ik_1)} e^{-2\mathrm{ik}_1L} + B_1 \end{cases}$$

$$\mathrm{B}_3\left(e^{2\mathrm{ik}L} - e^{-2\mathrm{ik}L}\right) = \mathrm{A}_1 e^{-2\mathrm{ik}_1L}\left(\frac{(k + k_1)}{(k - k_1)} - \frac{(k - k_1)}{(k + k_1)}\right)$$

$$\frac{\mathrm{B}_3}{\mathrm{A}_1} 2i \sin 2\mathrm{k}L = e^{-2\mathrm{ik}_1L} \frac{4kk_1}{k^2 - k_1^2}$$

Pr : J. Meziane

$$T = \left\| \frac{B_3}{A_1} \right\|^2 = \frac{4kk_1}{\left(k^2 - k_1^2\right)\sin^2 2kL}$$



Pr : J. Meziane

Chapitre IV Formalisme Mathématique de Mécanique Quantique

1) Espace des fonctions d'ondes F

La fonction d'onde **ψ(r, t)** représente la seule et l'unique connaissance que nous possédons sur l'état du système.

En mécanique quantique

Une particule de masse m et de vitesse v ➔ Sera décrite par une fonction de type :

$$\Psi(r,t) = \int_{R^3} g(k)\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\,\vec{r} - E\,t)}\, d^3k$$

Son existence est gérée :

La densité de probabilité où la présence en un point

$$\frac{\|\Psi(r_0,t)\|^2}{\int_{IR^3} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r}$$

La probabilité de présence de la particule dans un espace D autour de la position r

$$\text{Proba}(r \in D) = \frac{\int_D \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r}{\int_{IR^3} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r}$$

Dans l'espace

$$\int_{IR^3} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r = 1$$

C'est des fonctions de carrée sommable $\int_{IR^3} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r = 1$ où $\sum_{i=1}^{\infty} \|\Psi_i(r,t)\|^2 = 1$

Son évolution dans le temps est donné par : Équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\Psi(r,t) + V(r)\,\Psi(r,t) = E\Psi(r,t)$$

m la masse de la particule,
V(r) l'énergie potentielle de la particule au point r,
Δ est le Laplacien.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05457\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

La probabilité pour que la particule soit située dans le volume $dV=d^3r$ autour du point r au temps t est donnée par:

$$\left.\begin{array}{l} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r \\ \|\Psi(x,t)\|^2 dx \end{array}\right\} \Rightarrow$$

La particule existe dans l'espace ➔ la fonction d'onde est normée.

$$\left.\begin{array}{l} \int_{R^3} \|\Psi(r,t)\|^2 d^3r = 1 \\ \int_{R} \|\Psi(x,t)\|^2 dx = 1 \end{array}\right\}$$

1.1) Produit scalaire hermitien

F est muni d'un **Produit scalaire**

$$\left.\begin{array}{l} <\varphi(\mathrm{r}),\psi(\mathrm{r})>=\int_{R^3}\varphi^*(\mathrm{r})\psi(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}\in\not\subset \\ <\varphi(\mathrm{x}),\psi(\mathrm{x})>=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*(\mathrm{x})\psi(\mathrm{x})\mathrm{dx}\in\not\subset \end{array}\right\}$$

Ce produit scalaire est **hermitien**

$$<\varphi(r) ,\psi(r)> = <\psi(r), \varphi(r)>^*$$

La norme

$$<\psi(\mathrm{r}),\psi(\mathrm{r})>=\int_{R^3}\psi^*(\mathrm{r})\psi(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}\geq 0$$

Le module

$$\|\psi(\mathrm{r})\|=\sqrt{\psi^*(\mathrm{r})\psi(\mathrm{r})}\geq 0$$

$$\|\psi(\mathrm{x})\|=\sqrt{\psi^*(\mathrm{x})\psi(\mathrm{x})}\geq 0$$

Si $<\varphi(r) , \psi(r) > = 0$ ⇔ $\varphi(r)$ et $\psi(r)$ sont dits orthogonaux.

1.1.1) Le produit scalaire est linéaire / ψ(r) :

$$<\varphi(\mathrm{r}),\alpha\psi_1(\mathrm{r})+\beta\psi_2(\mathrm{r})>=\alpha\int_{R^3}\varphi^*(\mathrm{r})\psi_1(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}+\beta\int_{R^3}\varphi^*(\mathrm{r})\psi_2(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}$$

$$=\alpha<\varphi,\psi_1>+\beta<\varphi,\psi_2>$$

1.1.1) Anti linéaire / φ(r) :

$$<\alpha\varphi_1(\mathrm{r})+\beta\varphi_2(\mathrm{r}),\psi>=\alpha^*\int_{R^3}\varphi_1^*(\mathrm{r})\psi(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}+\beta^*\int_{R^3}\varphi_2^*(\mathrm{r})\psi(\mathrm{r})\mathrm{d}^3\mathrm{r}$$

$$=\alpha^*<\varphi_1,\psi>+\beta^*<\varphi_2,\psi>$$

Finalement, le produit scalaire satisfait l'inégalité de Schwarz :

$$\|<\varphi(\mathrm{r}),\psi(\mathrm{r})>\|\leq\sqrt{<\psi(\mathrm{r}),\psi(\mathrm{r})><\varphi(\mathrm{r}),\varphi(\mathrm{r})>}$$

1.2) Base dans F

1.2.1) Base discrète

Définition

$$\{\mathrm{u_i(r)}\}\ (\mathrm{i})_1^n\ \ \mathrm{u_i}\in \mathrm{F}$$

Est dite base orthonormée de F si et seulement si

i) la base est orthonormée

$$<\mathrm{u_i(r)},\mathrm{u_j(r)}>=\delta_{ij}=\begin{cases}0\ \text{si}\ \mathrm{i}\neq \mathrm{j}\\ 1\ \text{si}\ \mathrm{i}=\mathrm{j}\end{cases}$$ C'est la Relation d'ortho-normalisation

δ_{ij} Symbole de Kroeneker.

Si $\{u_i(r)\}\ (i)_1^n\ \ u_i \in F_i$ est une base de F alors

$$\forall\psi\in \mathrm{F}\ \exists \mathrm{c_i}\in\not\subset\quad \text{tel que}\qquad \psi(\mathrm{r})=\sum_i \mathrm{c_i u_i(r)}$$

$\{c_i\}$: représentation de $\psi(r)$ dans la base $\{u_i\}$

c_i : i^{iem} composante de $\psi(r)$ /à $u_i(r)$, elle est indépendante de r

Pour calculer c_i

$$\boxed{<\mathrm{u_i(r)},\psi(\mathrm{r})>=<\mathrm{u_i(r)},\sum_j \mathrm{c_j u_j(r)}>=\sum_j \mathrm{c_j}<\mathrm{u_i(r)},\mathrm{u_j(r)}>=\sum_j \mathrm{c_j}\delta_{ij}=\mathrm{c_i}}$$

D'où $c_i = < u_i , \psi>$: elle est indépendante de r

Application

Soit

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i(r)$$

$$\varphi(r) = \sum_j b_j u_j(r)$$

Alors le produit scalaire

$$< \varphi(r), \psi(r) >= \sum_{ij} < b_j u_j(r), c_i u_i(r) >$$
$$= \sum_{ij} b_j^* c_i < u_j(r), u_i(r) >$$
$$= \sum_{ij} b_j^* c_i \delta_{ij}$$
$$= \sum_i b_i^* c_i$$

Pour φ(r) = ψ(r) : est La norme de ψ(r)

$$< \psi(r), \psi(r) >= \sum_i c_i^* c_i = \sum_i \| c_i \|^2$$

ii) Relation de fermeture

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i(r) = \sum_i < u_i, \psi > u_i(r)$$
$$= \sum_i \left(\int_{R^3} u_i^*(r') \psi(r') d^3 r' \right) u_i(r)$$
$$= \int_{R^3} \sum_i u_i^*(r')\, u_i(r)\, \psi(r') d^3 r'$$

soit $\sum_i u_i^*(r')\, u_i(r) = \delta(r'-r) = \begin{cases} 0 \text{ si } r' \neq r \\ 1 \text{ si } r' = r \end{cases}$ **C'est la relation de fermeture**

δ(r' – r) Distribution de Dirac

On dit que $\{u_i\}$ est u**ne base orthonormée complète**

Relation d'ortho-normalisation : $< u_i, u_j > = \delta_{ij}$

Relation de fermeture : $\sum_i u_i^*(r')\, u_i(r) = \delta(r'-r) = \begin{cases} 0 \text{ si } r' \neq r \\ 1 \text{ si } r' = r \end{cases}$

1.2.2) Base continue

Définition

$$\{v_\alpha(r)\} \quad v_\alpha \in F \text{ et } \alpha \in \Re$$

Est dite base orthonormée de F si et seulement si

i) Relation d'ortho-normalisation

$$< v_\alpha, v_\beta >= \int_{R^3} v_\alpha^*(r)\, v_\beta(r) d^3 r = \delta(\alpha - \beta) = \begin{cases} 0 \text{ si } \alpha \neq \beta \\ 1 \text{ si } \alpha = \beta \end{cases} \quad \text{Relation d'ortho-normalisation}$$

δ(α - β) Distribution de Dirac

Si v_α est une base de F alors

$$\forall \psi \in F \;\; \exists c(\alpha) \in \not\subset \text{ tel que } \psi(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\alpha) v_\alpha(r) d\alpha$$

{c(α) } : représentation de ψ(r) dans la base $\{v_\alpha\}$

c(α) : composante de ψ(r) /à v_α , elle est indépendante de r

Pour calculer c(α)

Pr : J. Meziane

$$< v_\alpha(r), \psi(r) > = < v_\alpha(r), \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) v_\beta(r) d\beta > = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) < v_\alpha(r), v_\beta(r) > d\beta$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) \left(\int_{R^3} v_\alpha^*(r) v_\beta(r) d^3r \right) d\beta$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) \delta(\alpha - \beta) d\beta = c(\alpha)$$

D'où c(α) = < v_α , ψ> : elle est indépendante de

ii) Relation de fermeture

$\forall \psi \in F$

$$\psi(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\alpha) v_\alpha(r) d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} < v_\alpha(r), \psi(r) > v_\alpha(r) d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{R^3} v_\alpha^*(r') \psi(r') d^3r' \right) v_\alpha(r) d\alpha$$

$$= \int_{R^3} \psi(r') d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(r') v_\alpha(r) d\alpha = \int_{R^3} \psi(r') d^3r' \delta(r'-r)$$

$\int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(r') v_\alpha(r) d\alpha = \delta(r'-r)$ **Est la Relation de fermeture**

2) Espace des états ΄E : notation de Dirac

A toute fonction d'onde ψ(r, t) є F on associe donc un vecteur d'état nommé **ket** $|\psi\rangle$ є ΄E

Pour tout ψ(r, t) є F ➔ **ket** | ψ(t) > є ΄E

Remarque

La dépendance spatiale **r** n'apparait plus dans le ket.

ψ(r, t) correspond aux composantes du ket | ψ(t) > dans la base r.

De même, ψ(p, t) n'est qu'une composante de | ψ(t) > dans la base p.

Nous omettrons la dépendance en temps d'un vecteur d'état : | ψ(t) > ⇦➔ | ψ >

2.1) Produit scalaire et introduction de l'espace dual

$$|\psi\rangle \to \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \quad |\varphi\rangle \to \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$ Ou les c_i et b_i sont des nombres complexes.

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \dots & c_n^* \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} c_i^* b_i$$

Le bra < ψ | , élément dual de | ψ > , est donc simplement (dans une base donnée) le **transpose complexe conjugue** du vecteur colonne :

$$\langle \psi | \to \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \dots & c_n^* \end{pmatrix}$$

Pour les bases continues.

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{R^3} \psi(r)^* \varphi(r) d^3r \in ⊄$$

2.2) Operateurs dans l'espace de Hilbert

Un **operateur** transforme un ket de **´E** en un autre **ket** de **´E** et un **bra** de **´E*** en un autre **bra** de **´E***.

$$| \psi' > = A | \psi >$$
$$< \varphi' | = < \varphi | B$$

Le produit de deux operateurs n'est généralement pas commutatif :

$$AB \neq BA$$

On appel le commutateur

$$[A, B] = AB - BA$$

On appelle élément de matrice de A :

$$< \varphi |A| \psi >$$

Cet élément de matrice est un nombre complexe et il commute donc avec tout autre operateur

$$B < \varphi |A| \psi > = < \varphi |A| \psi > B$$

2.2.1) Operateur adjoint

Soit le ket $| \psi' > = A | \psi >$. A ce ket, correspond le bra $< \psi' | = < \psi | A^+$ ou A^+ est l'adjoint de A.

Pour un nombre complexe, l'adjoint n'est que le complexe conjugue : $(\alpha)^+ = \alpha^*$.

Pour une matrice, il s'agit du **transpose-complexe conjugue**.

Si A est une matrice $A^+ = ({}^tA)^*$

Exemple

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2i & 3 \\ 1 & 4 & 2 \\ i & 5i & 1-i \end{pmatrix}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} 1 & 2i & 3 \\ 1 & 4 & 2 \\ i & 5i & 1-i \end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -i \\ -2i & 4 & -5i \\ 3 & 2 & 1+i \end{pmatrix}$$

Propriétés de la conjugaison hermétique :

$$(\alpha A)^+ = \alpha^* A^+$$
$$(A^+)^+ = A$$
$$(A + B)^+ = A^+ + B^+$$
$$(A B)^+ = B^+ A^+$$
$$< A^+ \varphi | \psi > = < \varphi | A | \psi >$$
$$< \varphi | \beta\psi > = \beta < \varphi | \psi >$$
$$< \alpha\varphi | \psi > = \alpha^* < \varphi | \psi >$$

	Ket	**Bra**	**Opérateur**	**Scalaire**
	$\| \psi >$	$< \psi \|$	A	α
Adjoint	$< \psi \|$	$\| \psi >$	A^+	α^*

Exemple:

$$X = \alpha < U | A | V > | \psi > < \varphi |$$
$$X^+ = | \varphi > < \psi | < V | A^+ | U > \alpha^*$$

Son conjugué hermétique

Il faut inverser l'ordre d'écriture

2.2.3) Operateur hermétique

Un operateur A est dit hermétique si

$$A^+ = A$$

Exemple, l'operateur de projection est hermétique

$$(P_\psi)^+ = (|\psi\rangle\langle\psi|)^+ = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

2.2.4) Algèbre des commutateurs

Antisymétrie	$[A, B] = -[B, A]$
Linéarité	$[A, (B + C + ...)] = [A, B] + [A, C] +...$
Conjugue hermétique	$[A, B]^+ = [B^+, A^+]$
Distributivité	$[A,BC] = [A, B]C + B[A, C]$
Identité de Jacobi	$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$
Effet d'une constante	$[A, \alpha B] = \alpha[A, B]$

2.2.5) Fonction d'un operateur

Soit F(A) une fonction de l'operateur A. Si, A est linéaire, on peut alors développer F en série de puissance de A

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n$$

Par exemple, pour l'operateur $e^{\alpha A}$ ou est un nombre complexe, on obtient

$$e^{\alpha A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} A^n = I + \alpha A + \frac{\alpha^2}{2!} A^2 + \frac{\alpha^3}{3!} A^3 + \cdots$$

Le conjugue hermétique d'une fonction d'operateur est donc

$$(F(A))^+ = \sum_{n=0}^{\infty} f_n^* [A^n]^+ = \sum_{n=0}^{\infty} f_n^* [A^+]^n$$

Soit $|\psi\rangle$ un vecteur propre de A Avec λ comme valeur propre :

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Puisque

$$A^n|\psi\rangle = \lambda^n|\psi\rangle$$

$$F(A)|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \lambda^n|\psi\rangle = F(\lambda)|\psi\rangle$$

Important

Si $[A, B] = 0$ alors $[A, F(B)] = 0$

Si $[A, B] \neq 0$ Alors Si $[A, B] \neq 0$

Exemple

$[A, B] \neq 0$ alors $e^A e^B \neq e^B e^A \neq e^{A+B}$

Montrer que

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A, B]/2} \text{ si } [A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

2.2.6) Operateurs inverses et operateurs unitaires

L'inverse d'un operateur, s'il existe, est défini par

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

$$I \to \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ou I est l'operateur identité qui laisse tout ket inchangé

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Un operateur U est dit unitaire si son inverse est égal à son adjoint :

$$U^+ = U^{-1} \Rightarrow U^+ U = U U^+ = I$$

I est l'opérateur Identité :

2.3) Représentations dans l'espace des états ´E

2.3.1 Relations caractéristiques d'une base orthonormée : cas discret

$\{|u_i\rangle\}$ $(i)_1^n$ $|u_i\rangle \in E$

Est dite base orthonormée de´E si et seulement si

i) Relation d'orthonormalisation

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 \text{ si } i \neq j \\ 1 \text{ si } i = j \end{cases}$$

ii) Relation de fermeture

Si {| u_i >} est une base de´**E** alors

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = I$$

Un vecteur d'état |ψ> de s'écrit alors dans cette base

$$\forall|\psi\rangle \in E \;\; \exists c_j \in \mathbb{C} \text{ tel que } \quad |\psi\rangle = \sum_j c_j |u_j\rangle$$

Où les c_i sont donnés par :

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle = \langle u_i | \sum_j c_j | u_j \rangle = \sum_j c_j \langle u_i | u_j \rangle = \sum_j c_j \delta_{ij}$$

Dans ce ca on a

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i | \psi \rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle$$

Cette relation est importante en Mécanique quantique. Elle est utilisée pour retrouver les composantes d'un ket | ψ > dans la base {| u_i >}

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i | \psi \rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

2.3.2 Relations caractéristiques d'une base orthonormée : cas continu

$$\{|v_\alpha\rangle\} \; |v_\alpha\rangle \in E \text{ et } \alpha \in \mathbb{C}$$

Est dite base orthonormée de´E si et seulement si

i) Relation d'ortho-normalisation

$$\langle v_\alpha | v_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta) = \begin{cases} 0 \text{ si } \alpha \neq \beta \\ 1 \text{ si } \alpha = \beta \end{cases}$$

ii) Relation de fermeture

Si {| v_α > } est une base de´**E** alors

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| d\alpha = I$$

Un vecteur |ψ> de´**E s'écrit dans cette** base :

$$\forall|\psi\rangle \in E \qquad |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) |v_\beta\rangle d\beta$$

$$c(\alpha) = \langle v_\alpha | \psi \rangle = \langle v_\alpha | \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) |v_\beta\rangle d\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) \langle v_\alpha | v_\beta \rangle d\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\beta) \delta(\alpha - \beta) d\beta$$

Dans ce cas on a

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\alpha) |v_\alpha\rangle d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle v_\alpha | \psi \rangle |v_\alpha\rangle d\alpha = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| d\alpha\right)|\psi\rangle$$

De même pour retrouver les composantes du vecteur |ψ> dans la base {| v_α > } :

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha | \psi \rangle d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\alpha) |v_\alpha\rangle d\alpha$$

2.3.3) Représentation des kets et des bras

Base Discret

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_n|\psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \quad \text{Vecteur colonne}$$

Base continu,

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle v_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ c(\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Pour les bras, on a

$$\langle\psi| = \langle\psi| I = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle^* \langle u_i| = \sum_i c_i^* \langle u_i|$$

$$\langle\psi|u_i\rangle = \langle u_i|\psi\rangle^* = c_i^*$$

$$\langle\psi| \rightarrow \left(\langle\psi|u_1\rangle, \quad \langle\psi|u_2\rangle, \quad \langle\psi|u_i\rangle, \quad \ldots \quad \langle\psi|u_n\rangle\right) = \left(c_1^*, \quad c_2^*, \quad c_3^*, \quad \ldots \quad c_n^*\right) \quad \text{Vecteur ligne}$$

Remarque

Le produit d'un bra par un ket = produit scalaire

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \left(c_1^* \quad c_2^* \quad c_3^* \quad \ldots \quad c_n^*\right) . \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} c_i^* b_i \in \mathbb{C}$$

Le produit d'un ket par un bra = Opérateur

$$|\psi\rangle\langle\varphi| \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \left(b_1^*, \quad b_2^*, \quad b_3^*, \quad \ldots \quad b_n^*\right) = \begin{pmatrix} c_1 b_1^* & c_1 b_2^* & \cdots & c_1 b_n^* \\ c_2 b_1^* & c_2 b_2^* & \cdots & c_2 b_n^* \\ c_i b_1^* & c_i b_2^* & c_i b_i^* & c_i b_n^* \\ c_n b_1^* & c_n b_2^* & \cdots & c_n b_n^* \end{pmatrix}$$

2.3.4) Représentation des opérateurs

2.3.4.a) Représentation d'un opérateur par une matrice carrée

$$A \rightarrow A_{ij} = \langle u_i| A | u_j \rangle$$

ou A_{ij} est l'élément de matrice ij de l'opérateur A dans la base $\{| u_i \rangle\}$

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ A_{i1} & \cdots & A_{ii} & A_{in} \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

L'opérateur identité peut être représenté par

$$I \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Exemple

$$AB \rightarrow (AB)_{ij} = \langle u_i | AB | u_j \rangle = \langle u_i | A\, I\, B | u_j \rangle = \langle u_i | A \sum_k | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle$$

$$= \sum_k \langle u_i | A | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

Qui est bien le produit matriciel usuel

2.3.4.b) Représentation du ket | ψ' > = A | ψ >

$$c'_i = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} c_j$$

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ \\ c'_i \\ c'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ A_{i1} & \cdots & A_{ii} & A_{in} \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ \\ c_i \\ c_n \end{pmatrix}$$

2.3.4.c) Représentation du nombre < φ |A | ψ >

$$\text{Soit } |\psi\rangle = \sum_i c_i | u_i \rangle \;;\; |\varphi\rangle = \sum_j b_j | u_j \rangle$$

En appliquant la relation de fermeture

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \sum_{ij} \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \begin{pmatrix} b^*_1 & \cdots & b^*_i & b^*_n \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ A_{i1} & \cdots & A_{ii} & A_{in} \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_j \\ c_n \end{pmatrix}$$

2.3.4.d) Propriétés de différentes matrices

Sachant que < ψ | A^+ | φ > = < φ | A | ψ >*

$$(A^+)_{ij} = \langle u_i | A^+ | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A^*_{ji}$$

2.3.5) Trace d'un opérateur

$$TrA = \sum_i A_{ii} = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle$$

2.3.6) Changement de base

Soit {| e_i > } une base de E

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad \sum_i | e_i \rangle \langle e_i | = I$$

Un vecteur | ψ > de E s'écrit dans cette base

$$|\psi\rangle = I |\psi\rangle = \sum_i | e_i \rangle \langle e_i | \psi \rangle = \sum_i c_i | e_i \rangle$$

Soit {| u_k >} une autre base de E

$$\langle u_k | u_l \rangle = \delta_{kl} \quad \sum_k | u_k \rangle \langle u_k | = I$$

Un vecteur | ψ > de E s'écrit dans la base {| u_k >}

$$|\psi\rangle = I |\psi\rangle = \sum_k | u_k \rangle \langle u_k | \psi \rangle = \sum_k d_k | u_k \rangle$$

Comment passer de {| e_i > } à {| u_k >}

En utilisant la relation de fermeture pour la base {| e_i > }

$$d_k = \langle u_k | \psi \rangle = \langle u_k | \left(\sum_i | e_i \rangle \langle e_i | \right) | \psi \rangle = \sum_i \langle u_k | e_i \rangle \langle e_i | \psi \rangle = \sum_i S^+_{ki} c_i$$

$$\text{Où } \langle e_i | u_k \rangle = S_{ik} \rightarrow \langle u_k | e_i \rangle = S^+_{ki}$$

Avec S est un opérateur de changement de base

En utilisant la relation de fermeture pour les bases {| u_k >} puis {| e_i >}

$$|\psi\rangle = \sum_k |u_k\rangle\langle u_k|\psi\rangle = \sum_{i,k} |u_k\rangle\langle u_k|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} S^+_{ki}\langle e_i|\psi\rangle|u_k\rangle = \sum_{i,k} S^+_{ki} c_i |u_k\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} |e_i\rangle\langle e_i|u_k\rangle\langle u_k|\psi\rangle = \sum_{i,k} S_{ki}\langle u_k|\psi\rangle|e_i\rangle = \sum_{i,k} S_{ki} d_k |e_i\rangle$$

On vérifie que S est unitaire.

$$(S^+S)_{kl} = \sum_i S^+_{ki} S_{ik} = \sum_i \langle u_k | e_i \rangle \langle e_i | u_l \rangle = \langle u_k | u_l \rangle = \delta_{kl}$$

On donc (S^+S) = I

Pour un opérateur

$$\langle u_k | A | u_l \rangle = A_{kl} = \sum_{i,j} \langle u_k | e_i \rangle \langle e_i | A | e_j \rangle \langle e_j | u_l \rangle = \sum_{i,k} S^+_{ki} A_{ij} S_{jl}$$

Soit

$$A' = S^+ A\, S$$

A' → matrice de A dans la base {| u_k > }

A → matrice de A dans la base {| e_i > }

2.4) Equations aux valeurs propres et observables

On dit qu'un ket | ψ > est vecteur propre de l'opérateur linéaire A avec la valeur propre λ si

$$A\,|\,\psi > = \lambda\,|\,\psi >$$

Equation aux valeurs propres de A

λ : valeur propre ϵ C ;

| ψ > est vecteur propre de A associé à λ

L'ensemble des valeurs propres {λ} est appelé spectre de A

λ ←→ | ψ > unique ➔ λ non dégénérée

λ ←→ ∃ | ψ_i > on dit que λ est dégénérée

Si pour la même valeur propre λ il existe plusieurs vecteurs propres | ψ_i > avec i = 1…g

g est appelé degré de dégénérescence ou ordre de λ

g est le nombre de vecteur propre correspondant a la même valeur propre λ

Tout ket | φ > de la forme :

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{g} c_j |\psi_j\rangle$$

Est vecteur propre de A avec la même valeur propre λ

$$A|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{g} c_j A|\psi_j\rangle = \lambda \sum_{j=1}^{g} c_j |\psi_j\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$

L'ensemble {| ψ_i >} des g kets propres de A associe à la valeur propre λ forme un espace vectoriel de dimension g.

2.5.1) Recherche des valeurs et des états propres

Les valeurs propres de A sont solution de l'équation :

$$\det((A - \lambda\, I) = 0$$

Equation caractéristique aux valeurs propre

Exemple 1

Considérons l'operateur A ayant comme représentation dans la base {$|e_1>$, $|e_2>$}

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow A^+ \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

$A = A^+$ Donc A est hermétique

Les valeurs propres

$$\det((A - \lambda I) = \det\begin{pmatrix} 1-\lambda & i \\ -i & 1-\lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow (1-\lambda)^2 - 1 = \lambda(2-\lambda) = 0 \Rightarrow \begin{cases} \lambda = 0 \\ \lambda = 2 \end{cases}$$

Donc les valeurs propres ne sont pas dégénérées.

Les vecteurs propres

Soit $|\psi>$ un vecteur propre correspondant à la valeur propre $\lambda = 0$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{2} c_i |e_i\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$A|\psi> = \lambda|\psi> = 0|\psi>$$

$$A|\psi\rangle = 0|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} c_1 + ic_2 = 0 \\ -ic_1 + c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow c_2 = ic_1$$

$|\psi_0\rangle = c_1\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ c_1 : constante de normalisation

Une fois normalise, on trouve

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1 \Rightarrow c_1^*(1 \quad -i).c_1\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \|c_1\|^2(1+1) = 1 \Rightarrow \|c_1\|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow c_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\text{Soit } |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle)$$

$\lambda = 2$

$$A|\varphi> = \lambda|\varphi> = 2|\varphi>$$

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{2} d_i |e_i\rangle = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$$

$$A|\varphi\rangle = 2|\varphi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -d_1 + id_2 = 0 \\ -id_1 - _2 = 0 \end{cases} \Rightarrow d_2 = -id_1$$

$|\psi_2\rangle = d_1\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ d_1 : constante de normalisation

Une fois normalise, on trouve

$$\langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1 = d_1^*(1 \quad i).d_1\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \|d_1\|^2(1+1) = 1 \Rightarrow \|d_1\|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow d_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle)$$

Exemple 2

Considérons l'operateur A ayant comme représentation dans la base {$|e_1>$, $|e_2>$, $|e_3>$ }

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres

$$\det((A-\lambda I) = \det\begin{pmatrix} -\lambda & \alpha & 0 \\ \alpha & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \alpha-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$-\lambda(-\lambda(\alpha-\lambda)) - \alpha(\alpha(\alpha-\lambda)) = -(\alpha-\lambda)^2(\alpha+\lambda) = 0 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = -\alpha \\ \lambda_2 = \lambda_3 = \alpha \end{cases}$$

On a donc une racine double $\lambda = -\alpha$ et une racine simple $\lambda = -\alpha$

Les vecteurs propres

Soit $|\psi_1>$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_1 = -\alpha$

$$A|\psi_1> = \lambda_1|\psi_1> = -\alpha|\psi_1>$$

$$|\psi_1\rangle = \sum_{i=1}^{3} c_i |e_i\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = -\alpha\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 + c_2 = 0 \Rightarrow c_2 = -c_1 \text{ et } c_3 = 0 \\ 2c_3 = 0 \end{cases}$$

$|\psi_1\rangle = c_1\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ Avec c_1 : constante de normalisation

Une fois normalisée, on trouve

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = 1 \Rightarrow \|c_1\|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow c_1 = \sqrt{\frac{1}{2}} \rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - |e_2\rangle)$$

soit $|\psi_{2,3}>$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_{2,3} = \alpha$

$$A|\psi_{2,3}> = \lambda_{2,3}|\psi_{2,3}> = \alpha|\psi_{2,3}>$$

$$|\psi_{2,3}\rangle = \sum_{i=1}^{3} d_i |e_i\rangle = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \alpha\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} d_1 - d_2 = 0 \\ d_1 - d_2 = 0 \quad \Rightarrow d_2 = d_1 \text{ et } d_3 \text{ quelconque} \\ d_3 \text{ quelconque} \end{cases}$$

Afin d'avoir l'orthonormalisation entre les deux vecteurs propres dans ce sous-espace dégénéré, on prend donc :

$|\psi_2\rangle = d_1\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $|\psi_3\rangle = d_3\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ d_1 et d_3 : constantes de normalisation

Une fois normalisée, on trouve

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + |e_2\rangle)$$

$$|\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |e_3\rangle$$

Les valeurs propres d'un operateur hermétique sont réelles

$$A^+ = A$$
$$<\psi | A | \psi>^* = <\psi | A^+ | \psi> = <\psi | A | \psi>$$
$$A | \psi> = \lambda | \psi>$$
$$<\psi | A | \psi> = \lambda <\psi | \psi>$$
$$<\psi | A | \psi>^* = \lambda^* <\psi | \psi>$$

Donc $\lambda^* = \lambda$ ➔ λ est réelle

Les vecteurs propres d'un operateur hermétique correspondant à des valeurs propres distinctes $\lambda \neq \alpha$ sont orthogonaux

$$A | \psi> = \lambda | \psi> \text{ et } A | \varphi> = \alpha | \varphi> \text{ tel que } \lambda \neq \alpha$$
$$<\varphi | A | \psi> = \lambda <\varphi | \psi>$$
$$<\varphi | A | \psi> = \alpha <\varphi | \psi>$$
$$(\lambda-\alpha) <\varphi | \psi> = 0$$

Puisque $\lambda \neq \alpha$

$<\varphi | \psi> = 0$

$| \psi>$ et $| \varphi>$ sont orthogonaux

Dans un espace de dimension finie, les vecteurs propres d'un opérateur hermitien forment une base.

2.5) Observables

Une observable = **un opérateur hermétique** dont **les vecteurs propres forment une base**.

Un opérateur A est une observable si :

i) A hermétique ➔ $A^+ = A$

ii) Les vecteurs propres de A forment une base

$$\lambda_n \rightarrow |\psi_n^1\rangle,\ |\psi_n^2\rangle,\ \ldots,\ |\psi_n^{g_n}\rangle$$

Démonstration :

λ_n valeurs propre de A $\Rightarrow |\psi_n^i\rangle$

n = 1… N dim de Ɛ; i = 1...g_n (ordre de $\lambda_n = g_n$)

g_n est le degré de dégénérescence de la valeur propre λ_n = le nombre de vecteurs propres associés à λ_n

$\{|\psi_n^i\rangle\}$ Forment une base complète

$$\langle\psi_n^i|\psi_m^j\rangle = \delta_{ij}\delta_{nm} \quad \sum_{n=1}^{N}\sum_{i=1}^{g_n}|\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| = I$$

Exemple

Considérons l'operateur A ayant comme représentation dans la base {$| e_1 >$, $| e_2 >$}

Considérons l'operateur A ayant comme représentation dans la base {$|e_1>$, $|e_2>$}

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \ ➔ \ A^+ \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

$A = A^+$ Donc A est hermétique

Vecteurs propres

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle) \text{ Pour } \lambda = 0$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle \text{ Pour } \lambda = 2$$

Ces vecteurs propres sont normés

✓ $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle e_1| - i\langle e_2|).\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle = 1$

✓ $\langle\psi_2|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle e_1| + i\langle e_2|).\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle) = 1$

Ces vecteurs propres sont orthogonaux

✓ $\langle\psi_0|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle e_1| - i\langle e_2|).\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle) = \frac{1}{2}(\langle e_1|e_1\rangle - \langle e_2|e_2\rangle) = 0$

✓ $\langle\psi_2|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle e_1| + i\langle e_2|).\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle) = \frac{1}{2}(\langle e_1|e_1\rangle - \langle e_2|e_2\rangle) = 0$

Relation de Fermeture

✓
$$|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}.\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -i\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}.\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & i\end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = I$$

Donc {| ψ_0 > , | ψ_2 >} forme une base complète
Alors A est une observable
Important :

Dans un espace de dimension finie, un opérateur hermitien est une observable.

2.5) Ensembles Complets d'Observables qui Commutent (E.C.O.C.)
a) Théorèmes généraux sur les opérateurs et observables qui commutent.
<u>Théorème n°1.</u>

Si deux opérateurs quelconques A et B commutent, alors :
Si |ψ> est vecteur propre de A associé à la valeur propre λ.
➔ B|ψ> est également vecteur propre de A associé à la même valeur propre λ

Démonstration :

A|ψ> = λ |ψ>
A(B|ψ>) = B(A |ψ>)= λ(B|ψ>) C. Q. F. D

On distingue deux cas :
- λ est non-dégénérée g =1.

B|ψ> = μ |ψ>
➔ |ψ> est également vecteur propre de B

- Si λ n'est pas dégénérée, |ψ> est aussi vecteur propre de B car tous les vecteurs propres associes à λ sont par définition proportionnel à |ψ> et donc nécessairement

B|ψ> α |ψ>

En d'autres mots, si g_n = 1, il n'y a par définition qu'un seul ket correspondant à la valeur propre λ et B|ψ> ne peut donc être diffèrent de |ψ> que par une phase.
- λ est dégénérée, $g_n \neq 1$.
B|ψ> appartient alors au sous-espace E_λ associe a la valeur propre λ de A

$$\forall\left|\psi^{i}\right\rangle \in E_{\lambda} \Rightarrow B\left|\psi^{i}\right\rangle = \left|\psi'\right\rangle = \sum_{k=1}^{g} C_k \left|\psi^{i}\right\rangle \in E_{\lambda}$$

L'application de B sur un ket appartenant à E_λ ne fait alors pas sortir de ce sous-espace. On dira donc que E_λ est globalement invariant (ou stable) sous l'action de B.

<u>Théorème n°2</u>.

> **Si deux observables A et B commutent, et si $|\psi_1>$ et $|\psi_2>$ sont deux vecteurs propres de A associés à deux valeurs propres différentes, ceci entraîne nécessairement que : $<\psi_2|B|\psi_1> = 0$**

Démonstration,

$$A|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle$$
$$A|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle$$
$$\Rightarrow AB|\psi_1\rangle = \lambda_1 B|\psi_1\rangle$$
$$\textit{et } AB|\psi_2\rangle = \lambda_2 B|\psi_2\rangle$$
$$\Rightarrow \langle\psi_2|AB|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|BA|\psi_1\rangle = \lambda_1\langle\psi_2|B|\psi_1\rangle \quad (1)$$
$$\textit{et } \langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle$$
$$\langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle^* = \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle^* = \lambda^*{}_2\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle^*$$
$$\Rightarrow \langle\psi_2|AB|\psi_1\rangle = \lambda_2\langle\psi_2|B|\psi_1\rangle \quad (2)$$

Nous nous sommes servis du fait que A et B sont deux observables et qu'elles commutent
En faisant (1)-(2), on obtient immédiatement :

$$0 = (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\psi_2|B|\psi_1\rangle$$

Comme $\lambda_1 \neq \lambda_2$, le théorème est démontré :

$$\Rightarrow \langle\psi_2|B|\psi_1\rangle = 0$$

<u>Théorème n°3.</u>

> **Si deux observables A et B commute i. e. [A, B] = 0, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états constituée de vecteurs propres communs aux observables A et B**.

Démonstration,

Soit A et B deux observables qui commutent
Soit $\{|\psi_n^i>\}$ l'ensemble des vecteurs propres de A
$A|\psi_n^i> = \lambda_n|\psi_n^i>$: vecteurs propres de A
A observable
Donc les vecteurs propres de A, $\{|\psi_n^i>\}$ forme une base orthonormée de $\mathcal{E}$

$$n = \{1, 2, \ldots, N\} \qquad \dim(\mathcal{E}) = N$$
$$i = \{1, 2, \ldots g_n\} \ (g_n : \text{ordre de } \lambda_n) \ \dim(\mathcal{E}_n) = g_n$$
$$<\psi_m^j|\psi_n^i> = \delta_{ij}\,\delta_{mn}$$
$$\sum_{n,i} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| = I$$

Les ensembles $\{|\psi_1^{g1}>\}$. $\{|\psi_2^{g2}>\}$, … $\{|\psi_n^{gn}>\}$ forment des sous-espaces propres E_n de l'espace complet des états du système E

Représentant B dans $\{|\psi_n^i>\}$

D'après le Théorème 2

$$<\psi_m^j|B|\psi_n^i> = \delta_{mn} = <\psi_m^j|B|\psi_n^i> = 0 \quad m \neq n$$

$$<\psi_n^j|B|\psi_n^i> \neq 0$$

Donc, en ordonnant les vecteurs de base de la façon suivante

$$\{|\psi_1^1>, \ldots, |\psi_1^{g1}>\}, \{|\psi_2^1>, \ldots, |\psi_2^{g2}>\}, \ldots, \{|\psi_n^1>, \ldots, |\psi_n^{gn}>\}$$

La matrice représentant l'operateur B est diagonale par blocs :

$$B \rightarrow \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \langle \psi_1^j|B|\psi_1^i \rangle \\ (g_1 x\, g_1) \end{bmatrix} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} \langle \psi_2^j|B|\psi_2^i \rangle \\ (g_2 x\, g_2) \end{bmatrix} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \begin{bmatrix} \langle \psi_3^j|B|\psi_3^i \rangle \\ (g_3 x\, g_3) \end{bmatrix} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

Notons que puisque les sous matrices g_n x g_n ont pour éléments $<\psi_n^j|B|\psi_n^i> = <\psi_n^i|B|\psi_n^j>^*$, elles sont hermétiques et donc toujours diagonalisables.

On désignera par $|\psi_{n,p}^i>$ les vecteurs propres communs à A et B :

$$A|\psi_{n,p}^i> = a_n|\psi_{n,p}^i> \quad \text{et} \quad B|\psi_{n,p}^i> = b_p|\psi_{n,p}^i>$$

Les indices **n** et **p** distinguent les valeurs propres de A et de B tandis que l'indice **i** sert à distinguer les différents vecteurs propres correspondant à la paire de valeurs propres a_n et b_p.

b) La définition d'un ECOC

On dit qu'un ensemble d'observables A, B, C, … forment un ECOC si :

1) Ses observables commutent deux a deux

2) Il existe une base orthonormée unique de vecteurs propres communs. (à un facteur de phase près)

Exemple

Un exemple très simple est celui d'une observable dont toutes les valeurs propres sont non-dégénérées :

$$A|\psi_k> = \lambda_k|\psi_k>$$

On voit que l'on peut identifier un vecteur propre $|\psi_k>$ par sa valeur propre λ_k

$$|\psi_k> \equiv |\lambda_k>$$

On dira, dans ce cas particulier, que l'observable A forme un ECOC à elle toute seule.

c) Comment construire un ECOC ?

Règle générale :

1) Si les valeurs propres a_i de A sont **non dégénérées** ➔ {A} forme un ECOC

2) Si les a_i de A sont **dégénérées** on lui ajoute une observable B qui commute avec A $[A, B] = 0$ puis on cherche une base orthonormée formés par les vecteurs propres communs de A et B (Th 3)

3) Si la donnée du couple de valeur propre $\{a_i, b_i\}$ détermine d'une manière unique un vecteur propre ➔ {A, B} forme un ECOC.

4) Si non, on ajoute une 3eme observable C qui commute avec A et B $[A, C] = [B, C] = 0$ puis on cherche une base orthonormée formés par les vecteurs propres communs de A, B et C.

5) Si la donnée de l'ensemble de valeur propre $\{a_i, b_i, c_i\}$ détermine d'une manière unique un seul vecteur propre ➔ {A, B, C} forme un ECOC.
6) Si non, on cherche une 4[eme] observable D qui commute avec A, B et C [A, D] = [B, D] = [C, D]= 0 puis on cherche une base orthonormée formés par les vecteurs propres communs de A, B, C et D.
Dans le cas général, il nous faudra un certain nombre d'observables pour obtenir ce résultat. Soit $|\Phi>$ un vecteur propre commun à l'ensemble des observables qui commutent :
A, B, C, D, E, F, …

$$A|\Phi> = a_i|\Phi> ;\ B|\Phi> = b_i|\Phi> ;\ C|\Phi> = c_i|\Phi>$$
$$D|\Phi> = d_i|\Phi> ;\ E|\Phi> = e_i|\Phi> ;\ F|\Phi> = f_i|\Phi>$$

A, B, C, D, E, F, … : ceci signifie donc que :

$$|\Phi> = |a_ib_ic_id_ie_if_i \dots>$$

Exemple

Considérons deux observables A et B ayant comme représentation dans la base $\{|e_1>, |e_2>, |e_3>\}$

$$A \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad B \to \begin{pmatrix} 3 & 0 & i \\ 0 & 4 & 0 \\ -i & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$AB \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 2 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 3 & 0 & i \\ 0 & 4 & 0 \\ -i & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 5i \\ 0 & 4 & 0 \\ -5i & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

$$BA \to \begin{pmatrix} 3 & 0 & i \\ 0 & 4 & 0 \\ -i & 0 & 3 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 2 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 5i \\ 0 & 4 & 0 \\ -5i & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

A B = BA

$$\det(A - \lambda I) \to \begin{pmatrix} 2-\lambda & 0 & i \\ 0 & 1-\lambda & 0 \\ -i & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix} = (2-\lambda)^2(1-\lambda) - (1-\lambda) = (1-\lambda)[(2-\lambda)^2 - 1] = 0$$

$a_{1,2} = 1$; $a_3 = 3$

{A} n'est pas un ECOC car $a_{1,2}$ est dégénérée deux fois

Vecteurs propres $a_{1,2} = 1$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} c_1 + ic_3 = 0 \\ c_2 \text{ quelconque} \end{cases} \Rightarrow c_3 = ic_1 \text{ et } c_2 \text{ quelconque}$$

Une fois normalise, on trouve

$$\left|\psi^1_{1,A}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e_1\rangle + i|e_3\rangle) = |1_A\rangle$$

$$\left|\psi^2_{1,A}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |e_2\rangle = |1_A\rangle$$

Vecteurs propres $a_3 = 3$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & i \\ 0 & -2 & 0 \\ -i & 0 & -1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} -c_1 + ic_3 = 0 \\ c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow c_1 = ic_3 \text{ et } c_2 = 0$$

$$\begin{cases} c_1 = i \\ c_3 = 1 \Rightarrow |\psi_{2,A}\rangle = C \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ c_2 = 0 \end{cases}$$

Une fois normalise, on trouve

$$|\psi_{2,A}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i|e_1\rangle + |e_3\rangle) = |3_A\rangle$$

{A} n'est pas un ECOC car $a_{1,2}$ est dégénérée deux fois

$$\det(B - \lambda I) \rightarrow \begin{pmatrix} 3-\lambda & 0 & i \\ 0 & 4-\lambda & 0 \\ -i & 0 & 3-\lambda \end{pmatrix} = (3-\lambda)^2(4-\lambda) - (4-\lambda) = (4-\lambda)[(3-\lambda)^2 - 1] = 0$$

$b_1 = 2$; $b_{2,3} = 4$

{B} n'est pas un ECOC car $b_{2,3}$ est dégénérée deux fois

Vecteurs propres $b_1 = 2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 2 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} c_1 + ic_3 = 0 \\ c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow c_3 = ic_1 \text{ et } c_2 = 0$$

$$\begin{cases} c_1 = 1 \\ c_3 = i \Rightarrow |\psi_{1,B}\rangle = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} \\ c_2 = 0 \end{cases}$$

Une fois normalise, on trouve

$$|\psi_{1,B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e_1\rangle + i|e_3\rangle) = |2_B\rangle$$

Vecteurs propres $b_{2,3} = 4$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & -1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} -c_1 + ic_3 = 0 \\ c_2 \text{ quelconque} \end{cases} \Rightarrow c_1 = ic_3 \text{ et } c_2 \text{ quelconque}$$

$$\begin{cases} c_1 = i \\ c_3 = 1 \\ c_2 \text{ quelconque} \end{cases} \Rightarrow |\psi^1_{2,B}\rangle = C \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } |\psi^2_{2,B}\rangle = C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Une fois normalise, on trouve

$$|\psi^1_{2,B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i|e_1\rangle + |e_3\rangle) = |4_B\rangle$$

$$\left|\psi^2_{2,B}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \left|e_2\right\rangle = \left|4_B\right\rangle$$

{B} n'est pas un ECOC car $b_{2,3}$ est dégénérée deux fois
Maintenant voyant si l'ensemble {A, B} forme un ECOC.

A		B		vecteurs propres communs à A et B
Vecteurs propres	Valeurs propres	Vecteurs propres	Valeurs propres	
$\left\|\psi^1_{1,A}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left\|e_1\right\rangle + i\left\|e_3\right\rangle)$	$=\left\|1_A\right\rangle$	$\left\|\psi_{1,B}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left\|e_1\right\rangle + i\left\|e_3\right\rangle)$	$=\left\|2_B\right\rangle$	$\|1_A, 2_B>$
$\left\|\psi^2_{1,A}\right\rangle = \left\|e_2\right\rangle$	$=\left\|1_A\right\rangle$	$\left\|\psi^2_{2,B}\right\rangle = \left\|e_2\right\rangle$	$=\left\|4_B\right\rangle$	$\|1_A, 4_B>$
$\left\|\psi_{2,A}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i\left\|e_1\right\rangle + \left\|e_3\right\rangle)$	$=\left\|3_A\right\rangle$	$\left\|\psi^1_{2,B}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i\left\|e_1\right\rangle + \left\|e_3\right\rangle)$	$=\left\|4_B\right\rangle$	$\|3_A, 4_B>$

Les vecteurs propres communs à A et B sont :

$$\left|\psi_{2,A}\right\rangle = \left|\psi^1_{2,B}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(i\left|e_1\right\rangle + \left|e_3\right\rangle) = \left|3_A, 4_B\right\rangle \;\Rightarrow\; |3_A, 4_B>$$

$$\left|\psi^2_{1,A}\right\rangle = \left|\psi^2_{2,B}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \left|e_2\right\rangle = \left|1_A, 4_B\right\rangle \;\Rightarrow\; |1_A, 4_B>$$

$$\left|\psi^1_{1,A}\right\rangle = \left|\psi_{1,B}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\i\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|e_1\right\rangle + i\left|e_3\right\rangle) = \left|1_A, 2_B\right\rangle \;\Rightarrow\; |1_A, 2_B>$$

Le couple de valeur propre $|3_A, 4_B>$ détermine d'une manière unique un seul vecteur propre commun à A et B. de même pour les couples $|1_A, 4_B>$ et $|1_A, 2_B>$.

la donnée du couple de valeur propre $\{a_i, b_i\}$ détermine d'une manière unique un seul vecteur propre commun à A et B

➔ {A, B} forme un ECOC.

Remarque : Pour un système physique donnée il existe plusieurs ECOC.

2.6) Représentations et opérateurs R et P

Au début de chapitre, nous avons associe a toutes fonctions d'onde ψ(r, t) de F un ket |ψ(t)> où |ψ> , de E :

$$\psi(r), \varphi(r) \in F \;\leftrightarrow\; |\psi>, |\varphi> \in E$$

Cette correspondance est telle que

$$\left.\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \int_{R^3} \varphi^*(r)\psi(r)d^3r \in \mathbb{C}\\ \langle\varphi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\psi(x)dx \in \mathbb{C}\end{aligned}\right\}$$

2.6.1) Représentation de position | r >

L'observable vectorielle de position s'exprime en coordonnées cartésiennes comme

$$R = X\vec{e}_x + Y\vec{e}_y + Z\vec{e}_z$$

Cette observable est diagonale dans la représentation de position donnée par la base {| r > } de même pour X, Y et Z.

$$R\,|\,r> = r\,|\,r>;\ X\,|\,x> = x\,|\,x>;\ Y\,|\,y> = y\,|\,y>;\ Z\,|\,z> = z\,|\,z>$$

ou **r est le vecteur position**. Dans cette base, les relations d'orthonormalisations et de fermeture sont

$$\langle r|r'\rangle = \delta(r-r') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$$

$$\int_{R^3} |r\rangle\langle r| d^3r = I \quad \text{Où } d^3r = dxdydz$$

Utilisant cette relation de fermeture, tout vecteur d'état |ψ> peut être développé sur la base des positions :

$$|\psi\rangle = \left(\int_{R^3} |r\rangle\langle r| d^3r\right)|\psi\rangle = \int_{R^3} |r\rangle\langle r|\psi\rangle d^3r = \int_{R^3} \psi(r)|r\rangle d^3r \Rightarrow \psi(r) = <r|\psi>$$

ψ(r) est la projection du vecteur | ψ > sur le vecteur | r >

De même la probabilité de trouver la particule dans l'élément de volume d^3r autour du point r

$$\|\Psi(r)\|^2 d^3r = \|\langle r|\Psi\rangle\|^2 d^3r$$

le produit scalaire dans cette base.

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3r\langle\psi|r\rangle\langle r|\varphi\rangle = \int d^3r\,\psi(r)^*\varphi(r)$$

2.6.2 Représentation d'impulsion | p >

On a les relations analogues à la représentation de position

$$P|\,p> = p\,|\,p>;\ P_X\,|\,p> = p_x\,|\,p>;\ P_Y\,|\,p> = p_y\,|\,p>;\ P_Z\,|\,p> = p_z\,|\,p>$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') = \delta(p_x - p_{x'})\delta(p_y - p_{y'})\delta(p_z - p_{z'})$$

$$\int |p\rangle\langle p| d^3p = I \quad \text{Où } d^3p = dp_x\, dp_y dp_z$$

Ainsi, tout vecteur d'état se décompose sur la base des impulsions comme

$$|\psi\rangle = \left(\int_{R^3} |p\rangle\langle p| d^3p\right)|\psi\rangle = \int_{R^3} |p\rangle\langle p|\psi\rangle d^3p = \int_{R^3} \psi(p)|p\rangle d^3p \Rightarrow \psi(p) = <p\,|\,\psi>$$

est la fonction d'onde usuelle en base p.

Pour passer de {| r > } à {| p > }.

$$\langle p|r\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-ipr/\hbar} \qquad \langle r|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{ipr/\hbar}$$

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, e^{+ipr/\hbar}\psi(p)$$

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-ipr/\hbar}\psi(r)$$

2.6.3 Opérateurs R et P

L'Opérateurs R

$$R = X\vec{e}_x + Y\vec{e}_y + Z\vec{e}_z$$

$$R|r\rangle = r|r\rangle = \left(X\vec{e}_x + Y\vec{e}_y + Z\vec{e}_z\right)|r\rangle = \left(x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z\right)|r\rangle$$

$$R\,\psi(r) = r\,\psi(r)$$

R est hermétique $R = R^+$

$$\langle\psi|R|\varphi\rangle = \int d^3r\langle\psi|R|r\rangle\langle r|\varphi\rangle = \int r\langle\psi|r\rangle\langle r|\varphi\rangle d^3r = \int r\langle r|\psi\rangle^*\langle\varphi|r\rangle^* d^3r$$
$$= \int r\langle\varphi|r\rangle^*\langle r|\psi\rangle^* d^3r = \left[\int r\langle\varphi|r\rangle\langle r|\psi\rangle d^3r\right]^*$$
$$= \langle\varphi|R|\psi\rangle^*$$

L'Opérateurs P

$$P = P_X\vec{e}_x + P_Y\vec{e}_y + P_Z\vec{e}_z$$

$$P|p\rangle = p|p\rangle = \left(P_X\vec{e}_x + P_Y\vec{e}_y + P_Z\vec{e}_z\right)|p\rangle = \left(p_x\vec{e}_x + p_y\vec{e}_y + p_z\vec{e}_z\right)|p\rangle$$

Les composantes de P et R dans les représentation | r > et | p >

$$\langle r|R|\psi\rangle = r\langle r|\psi\rangle$$
$$\langle p|P|\psi\rangle = p\langle p|\psi\rangle$$
$$\langle r|P|\psi\rangle = -i\hbar\nabla\langle r|\psi\rangle$$
$$\langle p|R|\psi\rangle = i\hbar\nabla_p\langle p|\psi\rangle$$

P est hermétique P = P⁺

$$\langle\psi|P_x|\varphi\rangle = \int d^3r\langle\psi|r\rangle\langle r|P_x|\varphi\rangle = \int \psi(r)^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(r))d^3r$$
$$= \iint dydz\int\psi(r)^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(r))dx$$
$$= -i\hbar\left(\iint dydz\underbrace{\left[\psi(r)^*\varphi(r)\right]_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \iint dydz\int\frac{\partial}{\partial x}\psi(r)^*\varphi(r)dx\right)$$
$$= +i\hbar\iint dydz\int\frac{\partial}{\partial x}\psi(r)^*\varphi(r)dx = \left[-i\hbar\iint dydz\int\frac{\partial}{\partial x}\psi(r)\varphi(r)^*dx\right]^*$$
$$= \langle\varphi|P_x|\psi\rangle^*$$

$$X|r\rangle = x|r\rangle$$
$$Y|r\rangle = y|r\rangle$$
$$Z|r\rangle = z|r\rangle$$
$$P_x|p\rangle = p_x|p\rangle$$
$$P_y|p\rangle = p_y|p\rangle$$
$$P_z|p\rangle = p_z|p\rangle$$

{X, Y, Z} et $\{P_x, P_y, P_z\}$ sont ECOC

Les relations de commutations canoniques entre les operateurs R et P.

$$[X, P_x] = i\hbar$$
$$[Ri, Rj] = 0; [Pi, Pj] = 0; [Ri, Pj] = i\hbar\delta_{ij}$$

Pour i, j = x, y, z. Notons que le commutateur est un operateur, on devrait donc écrire

$$[X, P_x] = i\hbar\, I$$

Nous laisserons tomber l'operateur identité lorsqu'aucune confusion n'est possible.

Démonstration :

$[X, P_x] = i\hbar$

Soit **ψ(x, t)** une fonction d'onde décrivant une particule quantique

Les opérateurs X et P_x agissent sur **ψ(x, t)** par :

$$X\psi(x, t) = x\psi(x, t)$$

$$P_x = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x,t)$$

$$[X, P_x]\boldsymbol{\psi(x,t)} = (XP_x - P_xX)\,\boldsymbol{\psi(x,t)} = XP_x\,\boldsymbol{\psi(x,t)} - P_xX\,\boldsymbol{\psi(x,t)}$$

$$= X(-i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x,t)) + i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi(x,t))$$

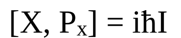
$$= -i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x,t) + i\hbar\psi(x,t) + i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x,t)$$

$$= i\hbar\psi(x,t)$$

D'où

$$[X, P_x]\boldsymbol{\psi(x,t)} = i\hbar\,\boldsymbol{\psi(x,t)}$$

Et donc :



$$[X, P_x] = i\hbar I$$

Pr : J. Meziane

Chapitre IV Postulats de la Mécanique Quantique

La mécanique quantique repose sur un ensemble de postulats.

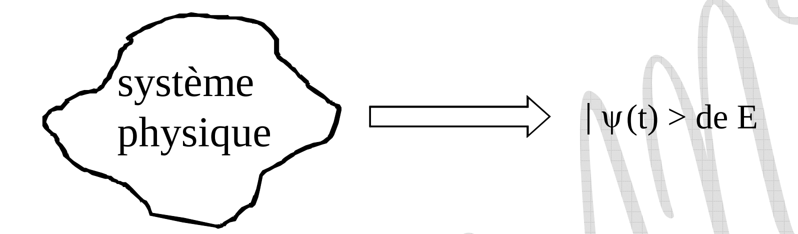
Ces postulats ne sont pas démontrer théoriquement, mais basés sur des observations expérimentales.

On **les accepte** comme vrai puisqu'ils **reproduisent** très bien ces observations.

1) Enoncé des postulats

1er postulat :

À chaque système physique est associe un espace de Hilbert E.
L'état du système est défini à chaque instant par un vecteur d'état normé $|\psi(t)>$ de E.



$\alpha\,|\psi(t)>$ est aussi un vecteur qui définit le même état $\alpha \in C$

2eme postulat :

À Toute grandeur physique mesurable *A* est associé un opérateur hermétique A de E représentant la grandeur *A*.

Cet opérateur A est une observable.

Grandeur physique mesurable ***A* : *M(A)*** ➔ **A agissant dans E**

Grandeur physique mesurable	**Observable**
Quantité de mouvement p	$P = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $P = -i\hbar\nabla$
Position (r ou x, y, z)	R ou X , Y, Z
Energie E = Ec+Ep = $E = Ec + Ep = \frac{1}{2}mv^2 + V(r)$	$H = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(R)$

3eme postulat :

La mesure d'une grandeur physique *A* ne peut donner qu'une des valeurs propres de l'observable A.

Remarques

i) La mesure de A ne peut donner que des valeurs réelles → A = observable.

ii) si le spectre de l'observable A **est discret** → les résultats que l'on peut obtenir en mesurant A **sont quantifiés**

4eme postulat :

La probabilité de trouver la valeur propre a_n (ici supposé discrète), lors de la mesure d'une grandeur physique *A* sur un système dans l'état normée $|\psi(t)\rangle$ est :
$P(a_n) = |P_n|\psi(t)\rangle|^2 = \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle$

Où $|\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle|^2 = 1$
P_n est le vecteur projecteur sur l'espace E_n
$|u_n\rangle$ est vecteur propre de A associé à la valeur propre a_n :
$\{|u_n\rangle\}$ forme une base de E
$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k |u_k\rangle$

- ✓ Si a_n est non dégénérée

$$P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$$

$$P(a_n) = \langle\psi(t)|u_n\rangle\langle u_n|\psi(t)\rangle = |\langle u_n|\psi(t)\rangle|^2 = |c_n|^2$$

- ✓ Si a_n est dégénérée avec le degré de dégénérescence g_n

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \sum_{i=1}^{g_n} c_k^i |u_k^i\rangle$$

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$

$$P(a_n) = \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\sum_{i=1}^{g_n}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{g_n}\langle\psi(t)|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{g_n}|c_n^i|^2$$

- ✓ Si $|\psi(t)\rangle$ n'est pas normée i. e. $|\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle|^2 \neq 1$

$$P(a_n) = \frac{\langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle}{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle} = \frac{\sum_{i=1}^{g_n}|c_n^i|^2}{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle}$$

- ✓ Spectre continue

La probabilité de trouver la particule entre α et α +dα

$$dP(\alpha) = |\langle V_\alpha|\psi(t)\rangle|^2 d\alpha = \langle\psi(t)|P_\alpha|\psi(t)\rangle d\alpha$$

- ✓ Remarques

On peut vérifier que : $\sum_n P(a_n) = 1$

$|\psi\rangle$ s'écrit dans la base $\{|u_n\rangle\}$: $|\psi(t)\rangle = \sum_k \sum_{i=1}^{g_n} c_k^i |u_k^i\rangle$

$$\sum_n P(a_n) = \sum_n \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle\psi(t)|\sum_{i=1}^{g_n}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\sum_n\sum_{i=1}^{g_n}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi(t)\rangle$$

Et comme

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| = I \text{ Relation de fermeture}$$

$\sum_n P(a_n) = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ **Car $|\psi\rangle$ est normée**

5eme postulat :

Si la mesure de la grandeur physique ***A*** sur le système dans l'état |ψ> donne comme résultat la valeur propre a_n .

L'état du système **|ψ'> immédiatement après la mesure** est la **projection normée de |ψ> sur le sous-espace propre associe à a_n** .

Immédiatement après la mesure de A on a :

$$|\psi'(t)\rangle = \frac{P_n|\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle}}$$

Où

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$

✓ **Remarques**

i) Si a_n est non dégénérée g_n =1; l'état |ψ'> après la mesure est :

$$P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$$

$$|\psi'\rangle = |u_n\rangle$$

Tout simplement le vecteur propre associe à a_n

ii) Immédiatement après la mesure le système n'a pas eu le temps d'évoluer.

iii) Si on fait un 2eme mesure on trouve la même valeur propre a_n

6eme postulat :

L'évolution dans le temps du vecteur d'état |ψ(t)> est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

Ou H(t) est l'observable associée a l'énergie totale du système, aussi appelée hamiltonien du système.

1.7) Règles de quantification

Comment passer de la description classique d'une grandeur physique ***A***, à la description quantique faisant intervenir l'observable correspondante A?

Grandeur physique Classique : ***A***(r, p, t) ➔ Observable quantique A(R, P, t)

Exemple

Energie : $E(r,p) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ ➔ Hamiltonien : $H(R,P) = \frac{P^2}{2m} + V(R)$

La correspondance est simple. On associe à la position r de la particule l'observable R, et à l'impulsion p de la particule l'observable P.

Important :

Ces observables (R et P) ne commutent pas. **[R, P] = iħ (voir T. D)**

Par exemple,

En mécanique classique, le produit

$$\mathbf{r \cdot p = p \cdot r}$$

Mais en mécanique quantique les opérateurs équivalents

$$\mathbf{R \cdot P \neq P \cdot R}$$

De même, ces produits ne sont pas hermétiques

$$\mathbf{(R \cdot P)^+ = (X \cdot P_x + Y \cdot P_y + Z \cdot P_z)^+ = P \cdot R \neq R \cdot P}$$

Il ne s'agit donc pas d'observables et ne peuvent être associées à des quantités physiques.

Il faut donc être vigilant lors du passage d'une description classique au quantique.

On ajoute donc aux postulats précédents une règle de **symétrisassions.**

Par exemple,

La quantité physique **r . p** sera associée à l'observable :

(R . P + P . R)/2 Qui est hermétique.

r . p = (r . p + p . r)/2 →(R . P + P . R)/2 qui est bien une observable

Règle de quantification :

L'observable A qui décrit une grandeur physique ***A*** définie classiquement s'obtient en remplaçant, dans l'expression **convenablement symétrisée** de ***A***, r et p par les observables R et P respectivement.

Exemple (Particule soumise a un potentiel scalaire).

Considérons par exemple l'hamiltonien d'une particule soumis à un potentiel scalaire V(r).

L'hamiltonien du système, en mécanique classique, s'écrit

$$H(\mathrm{r},\mathrm{p}) = \frac{\mathrm{p}^2}{2\mathrm{m}} + V(\mathrm{r}) \text{ Avec } \mathrm{p} = \mathrm{m}\frac{\mathrm{dr}}{\mathrm{dt}} = \mathrm{mv}$$

Où v est la vitesse de la particule et m sa masse.

L'application de la règle précédente donne l'hamiltonien quantique suivant :

$$\mathrm{H(R,P)} = \frac{\mathrm{P}^2}{2\mathrm{m}} + \mathrm{V(R)}$$

Exemple

Considérons par exemple la grandeur physique ***A*** = x . p_x

Son correspondant en mécanique quantique A = X . P_x

Mais $A^+ \neq A$ en désaccord avec A observable

➔ Il faut symétriser ➔ ***A*** =(x . p_x + p_x . x)/2

➔ Et de même symétriser ➔ A =(X . P_x + P_x . X)/2

Donc A^+ =(P_x . X +X . P_x)/2 =A ➔ A est hermétique

2) Mesures en mécanique quantique

2.1) Valeur moyenne d'une observable

la valeur moyenne d'une observable A dans l'état normé |ψ> noté <A> est la moyenne des résultats obtenues en effectuant un grand nombre de mesure sur le système dans le même état |ψ>.

$$\langle \mathrm{A} \rangle = \sum_n \mathrm{a_n P(a_n)} = \sum_n \mathrm{a_n} \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | \mathrm{u_n^i} \rangle \langle \mathrm{u_n^i} | \psi \rangle$$

Sachant que :

$$\mathrm{A} | \mathrm{u_n^i} \rangle = \mathrm{a_n} | \mathrm{u_n^i} \rangle$$

D'où

$$\langle \mathrm{A} \rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | \mathrm{A} | \mathrm{u_n^i} \rangle \langle \mathrm{u_n^i} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathrm{A} \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} | \mathrm{u_n^i} \rangle \langle \mathrm{u_n^i} | \psi \rangle$$

Et comme $\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} | \mathrm{u_n^i} \rangle \langle \mathrm{u_n^i} | = \mathrm{I}$ Relation de fermeture

Alors la valeur moyenne de A est :

$\langle \mathrm{A} \rangle = \langle \psi | \mathrm{A} | \psi \rangle$

✓ Remarques

i) Si <ψ|ψ> ≠ 1

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

ii) Si |ψ> est un vecteur propre de A

$$|\psi\rangle = |u_n\rangle \Rightarrow \langle A\rangle = \frac{\langle u_n|A|u_n\rangle}{\langle u_n|u_n\rangle} = a_n$$

Atome d'hydrogène a_0 = 53 pm

$$\psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r},0) = (\pi\, a_0^3)^{-1/2}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\langle\psi|R|r\rangle = r\langle\psi|r\rangle$$

La position moyenne

$$\langle R\rangle = \frac{\langle\psi|R|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle = 1} = \int d^3r\langle\psi|R|r\rangle\langle r|\psi\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^3\ \psi(\pi\, a_0^3)^{-1} e^{-2\frac{r}{a_0}} dr\, d\theta.\sin(\theta).d\varphi = \frac{3}{2}a_0$$

2.2) Ecarts quadratique moyen ou Ecarts types et relations d'incertitude

Les résultats de mesure d'une observable obéissent à une loi de probabilité.

➔ L'information est donc donnée sous forme d'une valeur moyenne.

➔ Il est utile de fournir une estimation de la distribution des résultats de mesures.

Soit une observable A

On définit l'opérateur A' =A - <A> : qui représente l'écart de A par rapport à sa valeur moyenne

L'écart quadratique moyen ou l'écart types noté ΔA de est défini par :

$$\Delta A = \sqrt{\langle A'^2\rangle} = \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle}$$

En développant : et sachant que A est une observable

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2\rangle} = \sqrt{\langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2} = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

2.2.1) Inégalités de Heisenberg.

Soit A et B deux observables qui ne commutent pas ➔ **[A, B] ≠0**

En général [A, B] est non hermétique mais C = i**[A, B] est hermétique**

$$C^+ = -i(\mathbf{AB\text{-}BA})^+ = -i(\mathbf{B}^+\mathbf{A}^+ \mathbf{-A}^+\mathbf{B}^+) = -i(\mathbf{BA - AB}) = i(\mathbf{AB\text{-}BA}) = C$$

On pose

A' =A - <A> et B' =B - <B>

On a

[A', B'] = [A - <A>, B - <B>] = [A, B] = iC

Considérons le ket

φ> = (A'+iλB')|ψ>

Avec λ réelle

On a < φ |φ> ≥ 0 c'est une norme

Donc

<ψ | (A'-iλB')(A'+iλB')|ψ> **≥ 0**

Ceci donne

$\langle A'^2\rangle + i\lambda \langle\psi | [A',B'] |\psi\rangle + \lambda^2\langle B'^2\rangle$ **≥ 0**

$\langle A'^2\rangle - \lambda \langle C\rangle + \lambda^2\langle B'^2\rangle$ **≥ 0**

Vrai quelque soit λ

On sait que pour qu'un polynôme du second ordre **P(λ) = a λ² + b λ + c** soit strictement positif.

Son discriminant D = b^2 -4*a*c doit être négatif.

$$D = \langle C \rangle^2 - 4\langle A'^2\rangle \langle B'^2\rangle \leq 0$$
$$\langle A'^2\rangle \langle B'^2\rangle \geq \langle C \rangle^2/4$$

Soit

$$\sqrt{\langle A'^2\rangle}\sqrt{\langle B'^2\rangle} \geq \frac{|\langle C\rangle|}{2}$$

donc

$$\Delta A.\Delta B \geq \frac{|\langle C\rangle|}{2} = \frac{|\langle \psi|[A,B]|\psi\rangle|}{2}$$

Inégalités de Heisenberg.

2.2.2) Application : la relation d'incertitude d'Heisenberg.

$A = X$ et $B = P_x$ → $[X, P_x] = i\hbar$ → $|\langle\psi|[X, P_x]|\psi\rangle| = \hbar$

$$\Delta X.\Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

2.3) Compatibilité des observables

Définition

Deux observables A et B sont dites compatibles, lorsqu'on peut les mesurer simultanément.

L'ordre dans le quel on effectue les mesures n'a alors aucun importance.

- ✓ $[A, B] = 0$

Il existe une base orthonormée de E formé des vecteurs propres communs à A et B $\{|a_n,b_p, i\rangle\}$ tel que

$$A|a_n,b_p, i\rangle = a_n |a_n,b_p, i\rangle \text{ et } B|a_n,b_p, i\rangle = b_p |a_n,b_p, i\rangle$$

Un vecteur $|\psi\rangle$ de E s'écrit :

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle$$

La mesure de A → a_n

Après la mesure

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_{p,i} c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle}{\sqrt{\sum_{p,i} \|c_{n,p,i}\|^2}}$$

La mesure de B après A → b_n

Après la mesure

$$|\psi''\rangle = \frac{\sum_{i} c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle}{\sqrt{\sum_{i} \|c_{n,p,i}\|^2}}$$

Remarque

Si A et B ne commute pas → on ne peut pas les mesurer simultanément

Conséquence :

Si on veut qu'une mesure détermine d'une façon unique l'état d'un système il faut que cette mesure porte sur un ECOC

- ✓ Exemple {A, B} ECOC

$\{|a_n,b_p\rangle\}$ base orthonormée de E

Un vecteur $|\psi\rangle$ de E s'écrit :

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p} c_{n,p} |a_n, b_p\rangle$$

La mesure de A → a_n

Après la mesure

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_p c_{n,p}|a_n, b_p\rangle}{\sqrt{\sum_p \|c_{n,p}\|^2}}$$

La mesure de B après A → b_n

Après la mesure

$$|\psi''\rangle = \frac{c_{n,p}|a_n, b_p\rangle}{\|c_{n,p}\|}$$

2.4) Propriétés de l'équation de Schrödinger

2.4.1) Cas général H dépend du temps

2.4.1.a) Conservation de la norme du vecteur d'état

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)$$

D'après l'équation de Schrödinger .

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle$$

H(t) est une observable donc hermétique .

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|H(t)$$

D'où

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle = 0$$

2.4.1.b) Évolution des valeurs moyennes dans le temps <A>

$$\langle A\rangle = \langle A\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)A(t)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|A(t)\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle\psi(t)|\left(\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)|\psi(t)\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)A(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|A(t)H(t)|\psi(t)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left\langle\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A(t), H(t)]\rangle$$

2.4.3) Constante de Mouvement

Pour que ***A*** reste constante au cours du temps il faut que

$\left\langle\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right\rangle = 0$ et $[A(t), H(t)] = 0$

Exemple

A(t) = H(t) → [H(t), H(t)] = 0

Donc l'hamiltonien est une constante de mouvement si $\frac{\partial H(t)}{\partial t} = 0$

→ On retrouve le loi de conservation de l'énergie d'un système isolé.

2.4.1.d) Cas des systèmes conservatifs H ne dépend pas du temps

$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = 0$ ➔ système conservatif ou système isolé ➔ État stationnaire

- ✓ La mesure de l'énergie ➔ donne une valeur propre de H.

$H|\varphi_{n,i}\rangle = E_n\,|\varphi_{n,i}\rangle$ E_n , $\varphi_{n,i}$ ne dépendent pas du temps

E_n : Discrets ➔ spectre discret ➔ états liés du système

E_n : Continues ➔ spectre continu ➔ états libres

- ✓ À t =t_0 le système est dans $|\psi(t_0)\rangle$ tel que :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t_0)|\varphi_{n,i}\rangle$$

- ✓ À l'instant t le système est dans $|\psi(t)\rangle$ tel que :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t)|\varphi_{n,i}\rangle$$

Avec $c_{n,i}(t) = \langle\varphi_{n,i}|\psi(t)\rangle$

L'équation de Schrödinger : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

Appliquant $\langle\varphi_{n,i}|$ à droite et à gauche de l'inégalité :

$$\langle\varphi_{n,i}|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_{n,i}|H|\psi(t)\rangle$$

Soit

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_{n,i}(t) = E_n c_{n,i}(t)$$

La solution est

$$c_{n,i}(t) = c_{n,i}(t_0)\,e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}}$$

Donc

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t_0)\,e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}}|\varphi_{n,i}\rangle$$

Soit directement

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

La solution est

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}|\psi(t_0)\rangle$$

$e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}$ Est appelé opérateur évolution

Soit

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}|\psi(t_0)\rangle = e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}\sum_{n,i} c_{n,i}(t_0)\,|\varphi_{n,i}\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t_0)e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}|\varphi_{n,i}\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t_0)e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}}|\varphi_{n,i}\rangle$$

Exemple :

Système à deux niveaux ; $H|\varphi_1\rangle = E_1\,|\varphi_1\rangle$, $H|\varphi_2\rangle = E_2\,|\varphi_2\rangle$

A t = 0 Le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$$

A l'instant t donné

Pr : J. Meziane

Le système sera dans l'état :

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} |\varphi_1\rangle + c_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} |\varphi_2\rangle$$

- ✓ Cas particulier $|\psi(t_0)>$ vecteur propre de H ➔ H $|\psi(t_0)> = E_n |\psi(t_0)>$.

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_i c_{n,i}(t_0)|\varphi_{n,i}\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t)|\varphi_{n,i}\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_{n,i}(t_0) e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}} |\varphi_{n,i}\rangle = e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}} \sum_i c_{n,i}(t_0) |\varphi_{n,i}\rangle = e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}} |\psi(t_0)\rangle$$

L'état du système ne change pas au cours du temps

Pr : J. Meziane

VI Résolution de l'équation de Schrödinger cas d'un oscillateur harmonique

2) Oscillateur harmonique quantique à une dimension

2. 1) Equation de Schrödinger

L'hamiltonien classique pour l'oscillateur harmonique :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

L'hamiltonien quantique s'obtient, en utilisant les règles de quantification.
On remplace les variables classiques par les observables correspondantes.
La position x et l'impulsion p seront remplacés par les observables X et P

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Donc

$$H \neq f(t)$$

Dans la représentation {|x>}
On aura

$$p = i\hbar\frac{d}{dx}$$

$$H \mid \varphi_n\rangle = E_n \mid \varphi_n\rangle \;\Rightarrow\; H\varphi_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

2.2) Notation

On commence par définir les opérateurs

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \quad \text{et} \quad \hat{P} = \frac{P}{\sqrt{m\omega\hbar}}$$

Opérateurs sans dimension
L'hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{m\omega\hbar}{2m}\hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\hat{X}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right)$$

$$H = \hbar\omega\hat{H}$$

Avec

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right)$$

Opérateurs sans dimension

La relation de commutation entre X et P nous donne pour les opérateurs normalisés $\hat{X}$ et $\hat{P}$

$$[X; P] = i\hbar \;\Rightarrow\; \left[\hat{X}, \hat{P}\right] = i$$

2. 3) Opérateurs de création et d'annihilation

La résolution du problème aux valeurs propres est simplifiée en introduisant les operateurs non hermétiques suivant

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{P}\right)$$

Ces operateurs portent le nom d'operateur de création a^+ et operateur d'annihilation a,

$$[a, a^+] = \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{1}{2}(-i[\hat{X}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{X}])$$
$$= \frac{1}{2}(-i.i + i.-i)$$
$$= 1$$

On appellera le produit de ces opérateurs l'operateur nombre

$$N = a^+a = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i\hat{X}\hat{P} - i\hat{P}\hat{X}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i[\hat{X}, \hat{P}])$$
$$= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)$$

N est hermétique.

$$N^+ = (a^+a)^+ = a^+(a^+)^+ = a^+a = N$$
$$[N, a] = Na - aN = a^+a\,a - a\,a^+a = [a^+, a]a = -a \Rightarrow Na = aN - a$$
$$[N, a^+] = N\,a^+ - a^+\,N = a^+a\,a^+ - a^+\,a^+a = a^+[a, a^+] = a^+$$
$$N\,a^+ = a^+\,N + a^+$$

L'hamiltonien devient :

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$$

2.4) les valeurs et les vecteurs propres de H et N

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$$

H et N commutent
H et N ont des vecteurs propres communs
Selon le théorème fondamental, puisque l'hamiltonien est proportionnel à l'opérateur nombre, il commute avec ce dernier et ceux-ci ont en commun une base d'états propres que l'on notera $|\varphi_n>$. On a donc

$$\text{Si } N|\varphi_n> = \alpha_n|\varphi_n> \text{ et } H|\varphi_n> = E_n|\varphi_n>$$

Donc

$$E_n = \hbar\omega(\alpha_n + \frac{1}{2})$$

2.4.1) Propriétés des valeurs propres de H et de *N*

Soit $|\varphi_n>$ les vecteurs propres normés de N associé à la valeur propre α_n .
$N|\varphi_n> = \alpha_n|\varphi_n>$ avec $||\varphi_n|| = 1$

- **N est une observable, donc α_n est réelle**
- **Les valeurs propres de N sont $\alpha_n \geq 0$**

$$<\varphi_n|N|\varphi_n> = \alpha_n <\varphi_n|\varphi_n> = <\varphi_n|a^+a|\varphi_n> = ||a|\varphi_n>||^2 \geq 0$$

- **$\alpha_n = 0$ si et seulement si $(a|\varphi_n>) = 0$**

$$\alpha_n = 0 \Leftrightarrow ||a|\varphi_n>||^2 = <\varphi_n|a^+a|\varphi_n> = <\varphi_n|N|\varphi_n> = \alpha_n <\varphi_n|\varphi_n> = 0$$

Alors

$$a|\varphi_n> = 0$$

- **α_n est nécessairement un entier ≥ 0**

$$N(a|\varphi_n>) = (aN - a)|\varphi_n> = (\alpha_n - 1)(a|\varphi_n>)$$

Ceci entraîne la conséquence suivante :
i) Soit $(a|\varphi_n>)$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\alpha_n - 1)$
ii) Soit $(a|\varphi_n>) = 0$

Par récurrence

Vrai pour 2

Exemple :

$$N(a^2|\varphi_n>) = N(a(a|\varphi_n>)) = (aN - a)(a|\varphi_n>) = (aNa - a^2)|\varphi_n>$$
$$= (a(aN-a) - a^2)|\varphi_n> = (a^2 N - 2a^2)|\varphi_n> = (\alpha_n - 2)(a^2|\varphi_n>)$$

Supposons vrai pour k

$$N(a^k|\varphi_n>) = (\alpha_n - k)(a^k|\varphi_n>)$$

Montrons que si vrai pour k+1

$N(a^{k+1}|\varphi_n>) = N(a(a^k|\varphi_n>)) = (aN - a)(a^k|\varphi_n>) = (aNa^k - a^{k+1})|\varphi_n> = (a(\alpha_n - k)a^k - a^{k+1})|\varphi_n>$

$$= ((\alpha_n - k)a^{k+1} - a^{k+1})|\varphi_n> = (\alpha_n - (k+1)(a^{k+1}|\varphi_n>)$$

Donc comme

$$N(a^k|\varphi_n>) = (\alpha_n - k)(a^k|\varphi_n>)$$

Alors on a

i) soit $(a^k|\varphi_n>)$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\alpha_n - k)$

ii) Ou bien $(a^k|\varphi_n>) = 0$.

0

$(a_n - n)$ $(a_n - k)$ $(a_n - 1)$ a_n

$a^{n+1}|f_n>$ $a^n|f_n>$ $a^k|f_n>$ $a|f_n>$ $|f_n>$

Comme les valeurs propres de N sont positives, il existe forcément un entier $n \geq 0$ pour le quel $(a^n|\varphi_n>)$ est un état propre de N avec la valeur propre $(\alpha_n - n)$, mais pour le quel $(a^{n+1}|\varphi_n> = 0)$. Ainsi $(\alpha_n - n) = 0$

Ce qui donne

$$\alpha_n = n$$

- **α_n + k est valeur propre de N pour tout $k \geq 0$**

$$||a^+|\varphi_n>||^2 = <\varphi_n|a\, a^+|\varphi_n> = <\varphi_n|(N+1)|\varphi_n> (\alpha_n+1)<\varphi_n|\varphi_n> \geq 0$$

Donc $(a^+|\varphi_n>)$ est un état non nul

$$N(a^+|\varphi_n>) = (a^+N + a^+)|\varphi_n> = (\alpha_n+1)(a^+|\varphi_n>)$$

$a^+|\varphi_n>$ est aussi vecteur propre de N avec la valeur propre $(\alpha_n + 1)$

Par récurrence, $((a^+)^k|\varphi_n>)$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\alpha_n + k)$.

Conclusion :

S'il existe une valeur propre de N, cette valeur propre est un entier positif ou nul et tous les entiers suivant sont également valeur propres de N.

2.4.2) Existence d'un état propre de valeur propre nulle

Si $|\varphi_n>$ est le vecteur propre associé à la valeur propre n alors :

$$(a|\varphi_n>) = 0 \Leftrightarrow n = 0$$

En effet

Si n = 0 on a

$<\varphi_n|N|\varphi_n> = n<\varphi_n|\varphi_n> = <\varphi_n|a^+a|\varphi_n> = ||a|\varphi_n>||^2 = 0$

$\Leftrightarrow a|\varphi_n> = 0$

Quel est la fonction propre associé à la valeur propre n = 0

Or

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

En représentation |x> : $(a|\varphi_0>) = 0$ s'écrit

$$\langle x|a|\varphi_0\rangle = 0 \Leftrightarrow \langle x|\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right]|\varphi_0\rangle = 0$$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\varphi_0(x) + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x) = 0$$

$$\frac{m\omega}{2\hbar}x\varphi_0(x) + \frac{d\varphi_0(x)}{dx} = 0$$

$$x\varphi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d\varphi_0(x)}{dx} = 0$$

$$\frac{d\varphi_0(x)}{\varphi_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,dx$$

$$\ln(\varphi_0(x)) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + Cst$$

$$\varphi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

L'équation $(a|\varphi_n>) = 0$ admet une unique solution normée

$$\varphi_0(x) = A\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

Après normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\|\varphi_0(x)\|^2 dx = A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)dx = A^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-y^2)dy = 1$$

Sachant ue

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-y^2)dy = \sqrt{\pi}$$

On a :

$$A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

2.4.3) Les valeurs propres de N sont non-dégénérées

Par récurrence,

- ✓ n = 0 : seul état propre

$$\varphi_0(x) = A\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

- ✓ Supposons pour $\alpha n = n$ il existe un seul état propre $|\varphi_n>$ tq $N|\varphi_n> = n|\varphi_n>$
- ✓ Montrons que (n+1) est non dégénéré

  Soit $|\psi>$ le vecteur propre associé à la valeur propre (n+1)

$$N|\psi> = (n+1)|\psi>$$

$$N(a|\psi>) = (aN - a)|\psi> = ((n+1) - 1)(a|\psi>) = n(a|\psi>)$$

Alors $a|\psi>$ état propre de N associé à la valeur propre n. Donc $a|\psi> = \lambda|\varphi_n>$.

Et comme

$$N|\varphi_n> = n|\varphi_n>$$

Donc

$$a|\psi> = \lambda|\varphi_n>$$

Ainsi

$$N|\psi> = (n+1)|\psi> = a^+\mathbf{a|\psi>} = a^+\boldsymbol{\lambda}\,\mathbf{|\varphi_n>} = \lambda a^+|\varphi_n>$$

La valeur propre (n+1) est non dégénérée

Pr : J. Meziane

$$|\psi\rangle = \frac{\lambda}{n+1} a^{+}|\varphi_n\rangle$$

État complètement défini à une constante près

2.4.4) Etats nombres |φ$_n$ >≡ |n>

Calcul de $|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle$ à partir de $|\varphi_0\rangle \equiv |0\rangle$:

$\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$

$|\varphi_1\rangle = c_1 a^{+}|\varphi_0\rangle$

$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = 1$

$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = \|c_1\|^2\langle\varphi_0|aa^{+}|\varphi_0\rangle = \|c_1\|^2\langle\varphi_0|(N+1)|\varphi_0\rangle = \|c_1\|^2\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$

$c_1 = 1$

$|\varphi_2\rangle = c_2 a^{+}|\varphi_1\rangle$

$\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = 1$

$\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = \|c_2\|^2\langle\varphi_1|aa^{+}|\varphi_1\rangle = \|c_2\|^2\langle\varphi_1|(N+1)|\varphi_1\rangle = 2\|c_2\|^2\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = 1$

$c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$|\varphi_n\rangle = c_n a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle$

$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1$

$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \|c_n\|^2\langle\varphi_{n-1}|aa^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = \|c_n\|^2\langle\varphi_{n-1}|(N+1)|\varphi_{n-1}\rangle = n\|c_n\|^2\langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = 1$

$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$

$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle$

Etat propre norme associé à la valeur propre n noté |n>, défini par récurrence par :

$$|n\rangle = \frac{a^{+}}{\sqrt{n}}|n-1\rangle$$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{n-1}}(a^{+})^2|\varphi_{n-2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\cdots\frac{1}{\sqrt{2}}(a^{+})^n|\varphi_0\rangle$$

Soit

$$|n\rangle = \frac{(a^{+})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{n-1}}(a^{+})^2|\varphi_{n-2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\cdots\frac{1}{\sqrt{2}}(a^{+})^n|\varphi_0\rangle$

En déduit de même que :

$a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}|\varphi_n\rangle$

$a\, a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = (N+1)|\varphi_{n-1}\rangle = (n-1+1)|\varphi_{n-1}\rangle = n|\varphi_{n-1}\rangle$

$a\, a^{+}|\varphi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}\, a|\varphi_n\rangle$

Soit :

$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle$

En représentation |x> :

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right]^n|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n \varphi_0(x)$$

Ce sont les fonctions de Hermite

$$\varphi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

Soit

$$\varphi_n(u) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(u - \frac{d}{du}\right)^n \exp(-\frac{u^2}{2})$$

Ou

$$u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$$

2.4.5) Action de a et a^+ sur les états |n>

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$a|n\rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } n = 0 \\ \sqrt{n}|n-1\rangle & \text{si non} \end{cases}$$

2.4.6) Décomposition spectrale du Hamiltonien

$$\sum_{n\in N}|n\rangle\langle n| = I \qquad \langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$$

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}) = \sum_{n\in N}\hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle\langle n|$$

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

2.4.7) Représentation matricielle des operateurs

$$X|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a)|n\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle\right)$$

$$P_x|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+ - a)|n\rangle$$
$$= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n+1}|n+1\rangle - \sqrt{n}|n-1\rangle\right)$$
$$\langle m|X|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\right)$$
$$\langle m|P_x|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\right)$$
$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}$$
$$P_X = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & -\sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}$$

a et a^+ sont représentés dans la base{|n>} par :

$$\langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}$$
$$\langle m|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$$

$$a|0\rangle \quad a|1\rangle \quad a|2\rangle \quad a|3\rangle \quad \cdots \quad a|n\rangle$$

$$a \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ \vdots \\ |n\rangle \end{pmatrix}$$

$$a^+ \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \\ \vdots \\ |n-1\rangle \\ |n\rangle \end{pmatrix}$$

(columns: $a^+|0\rangle$, $a^+|1\rangle$, $a^+|2\rangle$, $\cdots$, $a^+|n-1\rangle$, $a^+|n\rangle$)

L'operateur nombre N est diagonal dans la base {|n>}.

$$N = a^+a \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & 3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n \end{pmatrix}$$

L'operateur H est diagonal dans la base {|n>}.

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \rightarrow \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n+\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

3) Valeurs moyennes et écarts quadratiques moyens

$$\langle n|X|n\rangle = \langle n|P|n\rangle = 0$$
$$\langle n|a^m|n\rangle = \langle n|(a^+)^m|n\rangle = 0$$

Pour m > 0 et entier.

Les écarts quadratiques moyens ne sont pas nuls.

$$\Delta X^2 = \langle n|X^2|n\rangle - \langle n|X|n\rangle^2 = \langle n|X^2|n\rangle$$
$$\Delta P^2 = \langle n|P^2|n\rangle - \langle n|P|n\rangle^2 = \langle n|P^2|n\rangle$$

$$\begin{aligned} X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^+ + a)(a^+ + a) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{+2} + a^+a + aa^+ + a^2) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{+2} + a^+a + (a^+a+1) + a^2) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{+2} + a^2 + 2a^+a + 1) \end{aligned}$$

Pr : J. Meziane

$$P^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}(a^+ - a)(a^+ - a)$$

$$= -\frac{m\omega\hbar}{2}(a^{+2} + a^2 - 2a^+a - 1)$$

$$\Delta X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(a^{+2} + a^2 + 2a^+a + 1)|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\Delta P^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}\langle n|(a^{+2} + a^2 - 2a^+a - 1)|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1)$$

Le produit des écarts quadratiques moyens dans l'état |n> est donc

Ce produit respecte donc, comme il se doit, le principe d'incertitude. Notons que seul l'état |0> atteint l'égalité.

$$\Delta X \Delta P = (n + \frac{1}{2})\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$